



Vérification de Codes et Réduction de Modèles : Application au Transport dans les Plasmas Turbulents

Thomas Cartier-Michaud

► To cite this version:

Thomas Cartier-Michaud. Vérification de Codes et Réduction de Modèles : Application au Transport dans les Plasmas Turbulents. Modélisation et simulation. Aix-Marseille Université, 2015. Français. NNT : . tel-01252592

HAL Id: tel-01252592

<https://theses.hal.science/tel-01252592>

Submitted on 7 Jan 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE DE DOCTORAT
Université d'Aix-Marseille

École doctorale : *Physique et Sciences de la Matière*

Spécialité : **Physique théorique et mathématiques**

**Vérification de Codes et Réduction de Modèles :
Application au Transport dans les Plasmas Turbulents**

Presentée par :
Thomas Cartier-Michaud

Thèse soutenue publiquement le 24 juin 2015 devant le jury composé de :

Pr. Éric SONNENDRÜCKER	Rapporteur
Pr. Laurent VILLARD	Rapporteur
Dr. Édouard AUDIT	Examineur
Pr. Peter BEYER	Examineur
Pr. Jean-François PINTON	Examineur
Dr. Yanick SARAZIN	Directeur de thèse
Dr. Philippe GHENDRIH	Responsable CEA

Laboratoire d'accueil :
Institut de Recherche sur la Fusion par confinement Magnétique
CEA – Cadarache
13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

Dec 2011 – Mai 2015

A mes guides...

Remerciements

Je remercie les membres du jury d'avoir accepté mon invitation : Éric Sonnendrücker et Laurent Villard en tant que rapporteurs dont les relectures furent précieuses pour améliorer le manuscrit ; Edouard Audit, Jean-François Pinton et Peter Beyer (président du jury) qui m'ont accordé du temps pour discuter mes travaux avant la soutenance et ainsi mieux la préparer.

Je remercie Alain Bécoulet (chef d'institut), Philippe Magaud (chef de service) et Guido Ciralo (chef de groupe) de m'avoir accueilli à l'IRFM pour ma thèse et pour avoir appuyé ma demande d'une extension de contrat de 6 mois. Sans ce délai, je n'aurais pas pris le temps de formaliser la méthode PoPe, partie la plus originale et personnelle de cette thèse. Je remercie aussi Laurence Azcona et Nathalie Bihan qui m'ont aidé à ne pas me perdre dans les labyrinthes administratifs que j'ai eu à traverser.

Philippe Ghendrih (responsable CEA), je te remercie de m'avoir fait confiance, de m'avoir permis de gérer mes différentes priorités pour n'avoir aucun regret. Merci de m'avoir prodigué des conseils toujours fins et bienveillants, aussi bien sur le plan scientifique que sur le plan humain. Enfin, merci de m'avoir encouragé à développer des idées originales et à entamer des collaborations pour comprendre le rôle et le fonctionnement de la recherche. Yanick Sarazin (directeur de thèse), je te remercie d'avoir apporté recul, pédagogie et rigueur à mes travaux. Je te remercie en particulier pour ta disponibilité même dans l'urgence, tes relectures toujours rapides et d'une précision redoutable. Je vous remercie tous les deux de m'avoir intégré à vos travaux, dans une ambiance saine, sincère et agréable. Ce fut un réel plaisir de travailler avec vous et je le souhaite à de nombreux thésards encore !

Je remercie aussi l'équipe théorie / GYSELA team qui a participé au bon déroulement de ma thèse. Virginie Grangirard, merci pour tes conseils en mathématiques appliquées toujours donnés dans la bonne humeur, l'institutionnalisation de la pause café ainsi que les soirées Villauriennes ! Guillaume Latu, merci d'avoir partagé tes compétences en informatique. Je retiendrai ton pragmatisme et ton esprit de synthèse prompt à ramener à la réalité les physiciens théoriciens qui seraient partis trop loin. Chantal Passeron, merci pour ton aide en système, grâce à toi j'ai pu me dire, "Super ! Je vais porter TERESA sur un nouveau cluster !" cela n'aurait pas été si ludique sans ton aide... Xavier Garbet, merci pour tes contributions et la mise en place de collaborations avec le Japon, les USA et l'Inde. En te côtoyant, il m'est apparu évident que pour apporter quelque chose au groupe, il fallait que je me distingue en faisant quelque chose de "différent".

Merci à l'ensemble des membres de l'IRFM et en particulier à ceux avec qui j'ai pu échanger dans un bus, un couloir, un bureau et surtout à la pause café au 513 ! Pour ne citer qu'eux, merci à Marina Bécoulet, Rémi Dumont, Gloria Falchetto, Patrick Maget, Maurizio Ottaviani... d'être toujours prêts à partager des douceurs ramenées de conférences pour alimenter des discussions éclairées, passionnantes voir passionnées ! Je remercie aussi la "jeune génération", déjà savante mais pas encore sage, Guilhem Dif-Pradalier, Nicolas Ferdorzak, Eric Nardon et Patrick Tamain, vous faites à merveille le lien avec nos aînés. Je remercie évidemment, presque dans le désordre, les thésards (anciens, actuels et en devenir) et post-docs que j'ai eu le plaisir de côtoyer : Jérémie Abiteboul, qui, lorsqu'il rédigeait son manuscrit, a eu la patience de répondre à mes nombreuses questions en tant que co-bureau, Antoine Strugarek et son swag scientifique qui n'a d'égal que la somptuosité de son mariage, Antoine Merle ... pour nous avoir montré comment vexer François avec flegme, David Zarzoso qui a aussi dû supporter mes questions pendant mon stage, Hugo Bufferand, le triathlète adepte de rhums arrangés et devs (même s'il suit les expériences), Didier Vézinet, force de travail et de générosité, Sabine Cockenpot, qui a réussi à me faire danser au sextius, Timothée Nicolas, l'instigateur des "PhD talks" qui sera sûrement le seul Nobel que j'aurai connu (désolé les autres), Grégoire Hornung, d'une persévérance que je garde exemplaire, Farah Hariri, compatriote numérique, Pierre Cottier, organisateur de soirées culturelles, Yue Dong, le révolutionnaire de Taksim, Romain Futersack, l'altermondialiste qui sait gérer son stress, Alexandre fil, l'expert incontesté en jeux-vidéo mieux équipé que la Nasa, Clothilde Colin, contributrice en pâtisseries Maison pour la pause café, Fabien Rozar, coturne CEMRACS12 et vendeur de sommeil à Paris dont l'humour reste d'une finesse inégalée, Laura Mendoza, coturne CEMRACS14 qui ne joue pas de la guitare après minuit mais "YOLO" à tous les coups, Thomas Drouot, contributeur TERESA venant du grand nord, Jean Baptiste Girardo, le seul directeur d'EDF/AREVA que j'aurai connu, Hugo Arnichand, le ménestrel que l'on héberge volontiers pour une durée indéterminée, malgré Katia, Claudia Norscini, per la tua spontaneità e la tua finezza que sono stati per me fonte di motivazione (e per avermi prestato Philippe durante la redazione :-P), Damien Estève, co-bureau que j'ai essayé de martyriser au mieux avec les instructions de Frozar, Étienne Hodille, dont on cherche toujours les médicaments, Laurent Valade, champion de France de débat et amateur de Hot rods, Laurent Chônet, spécialiste, parfois incompris, de la transition L-H, Walid Helou, d'une profonde gentillesse, Cristian Sommariva, physicien numérique tombé sur Jorek, Jeaheon Ahn, amateur de la campagne de Alpes-de-Haute-Provence, Olivier Février, grand défenseur de l'humain (d'abord), Nicolas Nace, qui enterrera peut-être TOKAM2D FFT (vive TOKAM2D VF !?), Camille Baudoin, à la spontanéité dynamisante, Charles Ehrlacher, le défenseur de la patrie dont bien des soldats devraient s'inspirer, Davide Galassi, futur collègue TOKAM3X (j'espère !), Axel Jardin, relève parfaite de Didier, Julien Denis et Alberto Gallo, instigateurs du fancy-friday, Guillaume Ferriere, qui n'aura jamais fait de footing à Cadarache, Alexandra Brisset, "une stagiaire presque parfaite", Julien Bigot, grand pédagogue toujours prêt à partager son immense savoir en informatique, Jorge Morales, chef de file des Tigres Inter-galactiques (!), soutenu par Audrey entre deux missions pour rendre le monde meilleur, Maxime Lesure, contributeur TERESA

venant du pays du soleil levant, Olivier Thomine, toujours en cavale, Francesco Palermo, contributeur TERESA expert K-H, Peter Hill et David Moulton pour leur élégance so british. Sans oublier François Orain, alias "Tic" ou "Tac", merci pour le temps passé avec toi à vélo, chameau ou éléphant. Merci d'avoir partagé ta passion du mauvais goût, de la provoc' et de la langue Française (en ayant corrigé ce manuscrit). Et surtout merci des électrochocs que tu prodigues et que l'on reçoit avec une amitié sincère. Bon courage Capucine, ne le change pas trop, on espère tous le voir en costard orange pour le mariage !

Je remercie aussi les nombreuses personnes que j'ai rencontrées et avec qui j'ai grandi, avant mon passage au CEA, de l'école maternelle à l'INSA, Sébastien Barascou, Fadi Moshen, Hoel Talgorn, Luc Palavidino, Thomas Rinaldi, Olivier Chambault, Benoit Cantagrel, Sophie Desrumaux, Thibaut Sardan, Sarah Leveau, Thomas Beghin, Lucile Colas, Jonathan Compaore, Julien Capgras, Guillaume Jacob, Nicolas Sabatié, Julia Radoszycki, Hugo Zuin ... Mention spéciale à Guillaume Morisot ;-)

Je tiens aussi à remercier toute ma famille et en particulier mes parents qui ont su éveiller ma curiosité dès mon plus jeune âge et m'ont transmis le goût de l'effort. Merci de m'avoir accompagné en me montrant l'importance de chaque instant. Je remercie aussi Amandine ma grande sœur, exemple de détermination et douceur, qui m'a fait comprendre qu'il faut saisir sa chance pour faire quelque chose d'utile. Un jour, alors que j'étais en plein âge bête, tu m'as demandé ce que je voulais faire plus tard, je t'ai répondu que j'aimais bien les maths, la physique et l'informatique, donc que je me verrais bien faire des jeux vidéos : tu m'as alors fait les gros yeux en me disant que j'avais intérêt à faire quelque chose de plus utile ! J'espère que tu apprécies l'effort :-P. Je remercie aussi la nouvelle génération, Marius et Lee-Lou, de me rappeler pourquoi "on fait tout ça".

Enfin, je remercie Martina, mon trésor. Merci d'être à mes côtés, me motiver et me sortir de mes équations pour me faire courir dans la nature ou marcher dans les musées. Je crois que nous avons trouvé un bel équilibre et je suis impatient que l'on entreprenne de nouveaux projets à deux ! Ti amo tanto amore mio ♡.

Résumé

L'étude numérique est un outil de recherche qui est devenu incontournable, en particulier pour la compréhension et le contrôle des systèmes complexes. La simulation des plasmas de fusion par confinement magnétique s'inscrit parfaitement dans cette démarche. Une des difficultés de cette tâche est le rapport d'échelle, que ce soit les échelles d'espace du millimètre au mètre, ou les échelles de temps de la micro seconde à la seconde. La nature chaotique des plasmas et les très fortes anisotropies imposent l'utilisation de méthodes numériques avancées. C'est dans ce cadre que les deux volets de ma thèse s'inscrivent. J'ai mis en place la méthode PoPe, une procédure générale de vérification de codes que j'ai appliquée à deux outils de simulations : un code de turbulence fluide et un code de turbulence en régime cinétique. Avec ces outils j'ai réalisé l'étude du transport turbulent qui détermine la performance des plasmas de fusion.

Le principe de la méthode PoPe est de déterminer les équations qui ont permis de générer un ensemble de données : si les données sont issues d'un code de simulation, retrouver ces équations et les comparer au modèle théoriquement implémenté est équivalent à vérifier le code. La précision de la procédure permet de caractériser l'erreur commise jusqu'à retrouver l'ordre des schémas numériques employés. La première originalité de ce travail est le domaine d'applicabilité de cette procédure : aucun cadre restrictif n'est imposé, les simulations peuvent être en dimension quelconque, en régime pleinement non linéaire, voire chaotique. Le second intérêt est le faible coût de cette méthode : le travail analytique est élémentaire, le surcoût en temps de calcul est marginal, les développements informatiques sont minimaux et ne perturbent pas l'évolution des simulations ce qui permet d'appliquer PoPe à toutes les simulations de production. C'est donc un outil puissant pour le développement de codes de recherche car ils sont en perpétuelle évolution et utilisés pour sonder des comportements nouveaux.

Le second volet de ma thèse s'articule autour de l'étude du transport turbulent dans un modèle de bord fluide et un modèle cinétique restreint aux instabilités basse fréquence. Le transport du premier modèle est essentiellement sous forme d'avalanches chaotiques : c'est un transport quasiment balistique où des structures descendent des gradients. La forte sensibilité de ces avalanches par rapport aux conditions qui les déclenchent et qui les maintiennent rend le processus chaotique. Une étude du lien entre l'intensité du transport turbulent et le degré de chaos est menée en modifiant la viscosité du milieu. Le transport turbulent apparaît lorsque le degré de chaos dépasse un seuil, puis toute augmentation du degré de chaos après avoir dépassé un second seuil diminue l'efficacité du transport : il existe un degré de chaos maximisant l'intensité du transport. La compréhension du transport turbulent par avalanches est abordée sous l'angle de la réduction de modèle en cherchant, à l'aide de la méthode PoPe, un modèle capable de décrire ce comportement. Le paradigme usuel de la diffusion - convection est ainsi analysé et les conclusions obtenues sont en accord avec des études déjà réalisées, la méthode PoPe y apporte un cadre

systématique. Le second modèle de transport turbulent se caractérise par une description du transport comme résultant de deux régimes exclusifs : un régime de fort transport dû à des structures de potentiel électrique allongées dans la direction radiale d'une part, et d'autre part un régime de fort confinement dû à des structures allongées dans la direction perpendiculaire au rayon. Il est montré qu'un comportement de type avalanche précédemment vu dans ce modèle n'est pas d'origine physique mais est déclenché par des imprécisions numériques. Diverses modifications du modèle sont explorées pour retrouver le phénomène d'avalanche.

Abstract

Numerical analysis is now a key component of research, especially for the understanding and the control of complex systems. Simulations of magnetic confinement plasmas fall within this approach. One of the difficulties of this field is the wide range of scales. Spatial scales stretch from the millimeter to the meter, time scales stretch from the micro-second to the second. The chaotic nature of plasmas and the strong anisotropies require advanced numerical methods. Each of the two parts of my thesis take place in the frame of numerical simulation and fusion plasmas. I have set up the PoPe method, which is a general procedure for code verification. I have applied this method to two simulation tools : a fluid turbulence code and a kinetic turbulence code. Using these tools, I have studied the turbulent transport which determines performances of fusion plasmas.

The principle of the PoPe method is to determine the equations which have generated a set of data. If the data was produced by a simulation tool, finding these equations and comparing them to the ones theoretically implemented is equivalent to verifying this simulation tool. The accuracy of this procedure allows to characterize the numerical error and to recover the order of each numerical scheme used. The first originality of this work is its area of applicability : no restrictive frame is imposed, simulations can be performed in any number of dimensions, in nonlinear regimes, and even in chaotic regimes. The second strength of this method is its low overall cost : the analytical work is elementary, the computation time overhead is marginal and the programming is minimal. Moreover, it does not interfere with the evolution of the simulation. This allows to use PoPe on all production simulations. Therefore, this is a powerful tool for code development, especially in a research environment where codes evolve continuously to explore new behaviors.

The second part of my thesis deals with the study of turbulent transport in a fluid model and in a kinetic model restricted to the low frequency instabilities. In the first model, the transport is essentially in the form of chaotic avalanches : this is a quasi-ballistic transport where structures descend a gradient. The strong sensitivity of those avalanches to the mechanisms triggering and maintaining them make avalanches chaotic phenomena. A study of the link between turbulent transport intensity and the degree of chaos is carried out by changing the viscosity of the system. Turbulent transport appears only at a sufficiently high degree of chaos and its efficiency decreases when the degree of chaos increases above a second threshold. Thus, an optimal degree of chaos maximizing transport exists. The study of the avalanche-like turbulent transport is undertaken using the PoPe method, in order to find a reduced set of equations able to simulate this behavior. The common paradigm of diffusion - convection is analyzed and the conclusions are in agreement with past studies. The PoPe method introduces a systematic framework for these results. The second model of turbulent transport is characterized by two regimes of transport. The first highly efficient regime is based on electric potential structures elongated in the radial direction, while the second regime is based on structures elongated

in the direction perpendicular to the radius, which fully insulate the system. Avalanches had been observed in previous work simulating the same model. This is shown to be the result of numerical errors rather than physical processes. Several modifications of the model are undertaken in order to recover avalanches.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	v
Abstract	vii
1 Simulations et contrôle du transport turbulent : clefs du confinement	1
1.1 Principes de la fusion par confinement magnétique	1
1.2 Dégradation du confinement par la turbulence	2
1.3 La simulation numérique au cœur de la fusion	3
1.4 Sujet de thèse : vérification et réduction pour la turbulence	4
2 Vérification de codes, réduction de modèles : PoPe	7
2.1 Vérification et Validation de codes : qualité numérique	8
2.2 La finitude : source d'erreur en sciences numériques	12
2.2.1 La finitude de la convention de stockage	12
2.2.2 Les approximations nécessaires aux méthodes numériques	12
2.2.3 Les erreurs dans le code source	12
2.2.4 Les erreur issue de l'environnement d'exécution	13
2.3 Limites des outils traditionnels de vérification	13
2.3.1 Analyse linéaire : relation de dispersion	13
2.3.2 Étude des invariants d'un système	16
2.3.3 Method of Manufactured Solutions	17
2.4 Principes de la "Projection On Proper Elements"	18
2.5 Formulation théorique de PoPe	19
2.5.1 Nature et unicité d'une équation	19
2.5.2 Prise en compte d'un terme d'erreur	20
2.5.3 Restrictions imposées par la discrétisation d'une équation	21
2.5.4 Formalisme complet de la méthode PoPe	23
2.5.5 Mise en évidence d'une équation dans une simulation	26
2.6 Procédure pour la mise en place de PoPe	29
2.6.1 Modification de code sources, manipulation de boîtes noires	29
2.6.2 Développement des post-traitements de PoPe	29
2.7 Compréhension et traitement des résultats de PoPe	31
2.7.1 Étude du poids des équations, $\tilde{\alpha}$	32
2.7.2 Étude du résidu des équations, ε	36
2.7.3 Procédure de vérification de code	39
2.7.4 Vérification du code TOKAM 2D	40
2.7.5 Procédure de réduction de modèles	48
2.7.6 Vers l'interprétation de données expérimentales	49

3	Caractérisation de la turbulence de bord	53
3.1	Le modèle de bord implémenté dans TOKAM2D	54
3.1.1	Hypothèses définissant le modèle	54
3.1.2	Étude du système linéarisé	55
3.2	Conséquences du chaos sur les outils numériques	59
3.2.1	Mesure du chaos dans le système de Lorenz	59
3.2.2	Mesures du chaos dans TOKAM 2D	61
3.2.3	Fiabilité et caractérisation d'un système chaotique	69
3.3	Compétition entre chaos et transport turbulent	73
3.3.1	Restriction théorique de ν à de faibles valeurs	73
3.3.2	Forte variation du transport turbulent avec la viscosité ν	73
3.3.3	Relation entre maximum de transport, chaos et flux zonaux	76
3.4	Réductions contrôlées du modèle de TOKAM2D	78
3.4.1	Modèle type proie-prédateur : avalanches quasi-périodiques	79
3.4.2	Modèle de diffusion et convection 1D pour les avalanches	84
3.4.3	Réduction par dégradation du maillage de TOKAM2D	90
4	TERESA : outil de turbulence gyro-cinétique 4D	93
4.1	Modèle de la dynamique des particules piégées	94
4.1.1	Modélisation de la turbulence basse fréquence	94
4.1.2	Équation de Vlasov des ions piégés : géométrie 4D	97
4.1.3	Équilibre Maxwellien et forçage du système	97
4.1.4	Équation de quasi-neutralité 2D : influence des particules passantes	98
4.1.5	Étude linéaire du système : modes globaux instables	100
4.2	Code TERESA : Semi-Lagrangien & HPC	102
4.2.1	Vlasov 2 + 2D Semi-Lagrangien : décomposition de domaine	102
4.2.2	Champ d'advection issu de la quasi-neutralité 2D	108
4.2.3	Environnement HPC du code TERESA	111
4.3	Vérification du code TERESA par la méthode PoPe	113
4.3.1	Vérification de la quasi-neutralité en régimes réalistes	113
4.3.2	Vérification de Vlasov : disparition des petites échelles	115
5	Mécanismes du transport dans TERESA	117
5.1	Transition isolant-conducteur thermique	119
5.1.1	Définition des régimes "streamers" et "flux zonaux"	119
5.1.2	Transitoire vers les états asymptotiques avant blocage	120
5.1.3	Signature du transport dans l'espace des phases	121
5.1.4	Impact des paramètres externes	126
5.1.5	Équation de quasi-neutralité : contribution adiabatique	127
5.1.6	Erratum : aucune avalanche détectée...	130
5.1.7	Pistes de détermination de la valeur de λ	132
5.2	Processus de saturation : apparition d'avalanches	133
5.2.1	Transitions flux zonaux - streamers : étude du plan (δ_b, λ)	133
5.2.2	Forçage par les bains : transition totale	134

5.2.3	Forçage par le flux : régime intermédiaire	134
5.2.4	Utilisation d'un terme de pertes parallèles	135
5.3	Réduction fluide de simulations cinétiques	138
5.3.1	Dérivation d'une version fluide du modèle de TERESA	138
5.3.2	Contribution des termes de l'équation de Vlasov	139
5.3.3	Détection d'équations fluides dans TERESA avec PoPe	141
6	Conclusion	145
A	Illustrations de TOKAM 2D	153
A.1	Espace réel	153
A.2	Espace de Fourier	153
A.3	Potentiel électrique ϕ	153
A.4	Impact de Δt_{PoPe}	153
A.5	Visualisation des résidus dans l'espace réel	153
B	Éléments de codes pour PoPe	161
B.1	Calcul de dérivée temporelle pour PoPe	161
B.2	Calcul d'opérateurs de TOKAM2D pour PoPe	162
B.3	Assemblage et résolution du système PoPe	162
C	Généralisation et formalisme alternatif pour PoPe	163
C.1	Les étapes de la méthode PoPe	163
C.2	Premiers pas vers un formalisme plus puissant	164
D	Paramètres des simulations TERESA	167
	Bibliographie	169

Table des figures

1.1	Configuration magnétique d'un Tokamak et d'un Stellarator.	2
2.1	Diagramme de Qualification-Validation-Vérification [Greenwald 2010]. . .	8
2.2	Diagramme de Qualification-Validation-Vérification détaillé.	9
2.3	Organisation dans l'espace réel de la phase linéaire de TOKAM2D. . . .	15
2.4	Organisation dans l'espace de Fourier de la phase linéaire de TOKAM2D. .	15
2.5	Illustration du problème d'aliasing en utilisant trois sinusoides.	21
2.6	Ensembles et projections pour PoPe.	24
2.7	Illustrations dans l'espace réel d'opérateurs de TOKAM2D.	28
2.8	Schéma de l'utilisation de PoPe.	31
2.9	Traces temporelles des poids de plusieurs opérateurs, simulation TOKAM2D. .	33
2.10	PDF associées à des poids d'opérateurs de TOKAM2D.	34
2.11	Résidu dans l'espace réel et l'espace de Fourier pour TOKAM2D.	37
2.12	Dépendances du résidu mis en évidence par histogrammes 2D.	38
2.13	Convergence en Δt et Δt_{PoPe} de TOKAM2D.	41
2.14	Convergence en $N_x \times N_y$ et $n_x \times n_y$ de TOKAM2D.	43
2.15	Résidu dans l'espace de Fourier pour deux résolutions.	46
2.16	Bruit artificiel sur TOKAM2D pour tester la qualification avec PoPe. . .	50
2.17	Tests de qualification avec PoPe sur TOKAM2D.	51
3.1	Taux de croissance linéaire (analytique) $\gamma(k_x)$ et $\gamma(k_y)$ pour TOKAM2D. .	58
3.2	Taux de croissance linéaire (analytique) $\gamma(k_x, k_y)$ pour TOKAM2D. . . .	58
3.3	Illustration du chaos grâce à l'attracteur étrange de Lorenz.	60
3.4	Séparations exponentielles de traceurs passifs.	62
3.5	Mesures de distances entre traceurs passifs.	63
3.6	Densité, potentiel et champ d'exponentiation, simulation TOKAM2D. . .	65
3.7	Profils radiaux des coefficients d'exponentiation.	65
3.8	Divergence entre 2 simulations TOKAM2D initialement proches.	66
3.9	Distance entre des couples de simulations initialement proches.	67
3.10	Lyapunov mesuré à partir de couples de simulations.	68
3.11	Comparaison des trois mesures du chaos dans TOKAM2D.	68
3.12	Dépendance du Lyapunov par rapport à $N_x \times N_y$	69
3.13	Absence de turbulence sur un maillage sous-résolu.	70
3.14	Longueurs de corrélation dans l'espace et le temps.	73
3.15	Profils de la moyenne et de l'écart-type de la densité.	74
3.16	Dépendance en viscosité ν des flux turbulents.	75
3.17	Mise en évidence de 2 types de transport turbulent, transition liée au chaos. .	76
3.18	Comportement proie-prédateur au sein d'une simulation TOKAM2D. . .	80
3.19	Comportement proie-prédateur dans l'espace de Fourier.	80
3.20	Trace temporelle d'une proie et de prédateurs, simulation TOKAM2D. . .	81

3.21	Cycles proie-prédateur de différentes espèces.	82
3.22	Cycle proie-prédateur issue de TOKAM2D vs modèle anaytique.	83
3.23	Traces temporelles des poids $D_{eff}(t)$ et $V_{eff}(t)$ (diffusion / convection).	85
3.24	Dépendance de D_{eff} et V_{eff} par rapport à D et ν	86
3.25	Opérateurs d'une réduction diffusion/convection 1D de TOKAM2D.	88
3.26	Poids $D_{eff}(x, t)$ et $V_{eff}(x, t)$ d'une réduction diffusion / convection 1D.	89
3.27	Résidu lié à l'approche diffusion / convection 1D.	89
3.28	PDF décrivant le transport turbulent pour différentes résolutions $N_x \times N_y$	91
3.29	Réduction de modèle par sous-résolution, diminution de $N_x \times N_y$	92
3.30	Stabilité linéaire en fonction de la résolution $N_x \times N_y$	92
4.1	Surfaces magnétiques, trajectoires passante et banane d'un tokamak.	94
4.2	Description de l'espace réel en gyro-cinétique vs modèle rebond.	98
4.3	Analyse linéaire du modèle implémenté dans TERESA [Sarazin 2005].	101
4.4	Speed-ups MPI/OpenMP du code TERESA sur Rheticus et Helios.	112
4.5	Résidus mesurés par PoPe pour l'équation de quasi-neutralité.	114
4.6	Résidus mesurés par PoPe pour l'équation de Vlasov.	116
5.1	Cartes 2D de température en régimes streamers et flux zonaux.	119
5.2	Profils de température pour différents λ : régimes streamers et flux zonaux.	119
5.3	Chronologie d'une simulation TERESA dans les plans (Q, ZF) et (ZF, ZF')	120
5.4	Cartes du flux $\gamma_{\phi, \psi}$ dans le plan (E, t)	123
5.5	Cartes du flux $\gamma_{\phi, \alpha}$ dans le plan (E, t)	124
5.6	Trace temporelle des flux turbulents $\Gamma_{\phi, \alpha}(t)$ et $\Gamma_{\phi, \psi}(t)$	125
5.7	Profile de température pour différentes intensités de forçage par les bains.	126
5.8	Mesure du flux turbulent et du mode $\phi_{k_\alpha=0}$ dans le plan (λ, δ_b)	128
5.9	Carte $\phi(\alpha, \psi)$ de simulations contraintes en nombre de degrés de liberté.	129
5.10	Relaxation du profil de température, simulation entachée d'erreur.	131
5.11	Traces temporelles de la température (manuscrit de G. Darmet).	132
5.12	Deux transitions possibles entre flux zonaux et streamers dans le plan (λ, δ_b)	134
5.13	Intensité du transport turbulent en fonction de σ	136
5.14	Impact dans l'espace réel du puits sur le régime flux zonaux ($\lambda = 0$).	137
5.15	Opérateurs présents dans l'équation fluide du moment $n = 1$	139
5.16	Fermeture fluide : comparaison de l'évolution ∂_t et du résidu ε	141
A.1	Illustrations dans l'espace réel d'opérateurs de TOKAM2D.	154
A.2	Illustrations dans l'espace de Fourier d'opérateurs de TOKAM2D.	155
A.3	Illustrations dans l'espace de Fourier d'opérateurs de TOKAM2D.	156
A.4	Illustrations dans l'espace réel et de Fourier du potentiel électrique ϕ	157
A.5	$P_v(\partial_t \tilde{N})$, $P_v(\varepsilon_N)$ et $P_v(\tilde{\varepsilon}_N)$ pour $\Delta t_{PoPe} = 1 \omega_0$ et $512 \omega_0$	158
A.6	$P_v(\partial_t \tilde{N})$, $P_v(\varepsilon_N)$, $P_v(\tilde{\varepsilon}_N)$ et $\varepsilon_{N, \Phi}$ pour $N_x = N_y = 64$ et 256	159

Liste des tableaux

2.1	Deux ensembles de paramètres utilisés pour TOKAM2D.	31
2.2	Caractérisation statistique des PDF des poids des opérateurs de TOKAM2D.	33
3.1	Caractérisation et quantification des séparations exponentielles.	63
4.1	Grandeurs caractéristiques des trajectoires dans un tokamak.	96
5.1	Paramètres de contrôle externes : intervalles étudiés.	126
5.2	Paramètres de contrôle internes : intervalles étudiés.	127
5.3	Caractérisation statistique des poids d'une fermeture fluide pour TERESA.	142
D.1	Discretisations utilisées pour les simulations TERESA.	167
D.2	Valeurs utilisées pour les paramètres de contrôle externes (TERESA). . .	167
D.3	Valeurs utilisées pour les paramètres de contrôle internes (TERESA). . .	167

Simulations pour le contrôle du transport turbulent des plasmas : une clef du confinement magnétique

Sommaire

1.1	Principes de la fusion par confinement magnétique	1
1.2	Dégradation du confinement par la turbulence	2
1.3	La simulation numérique au cœur de la fusion	3
1.4	Sujet de thèse : vérification et réduction pour la turbulence . .	4

Ce manuscrit de thèse aborde la physique des plasmas sous l'angle des mathématiques appliquées. L'objectif de ce travail est d'améliorer les procédures de vérification de codes ainsi que la détermination de modèles réduits pour la compréhension du transport turbulent. Le cadre de la fusion par confinement magnétique, le rôle du transport turbulent et l'outil qu'est l'analyse numérique sont brièvement introduits dans ce chapitre. Ma motivation pour entreprendre ce travail réside essentiellement dans la finalité du projet auquel je contribue : la mise au point d'une nouvelle source d'énergie nucléaire, plus propre et plus sûre que la fission. Mon attrait pour la Science et les hautes technologies ont fait le reste...

1.1 Principes de la fusion par confinement magnétique

A l'inverse de la fission, les conditions d'obtention de la fusion nucléaire sont difficilement accessibles. Pour que deux noyaux d'atomes légers fusionnent, il est nécessaire de confiner une densité de particules suffisamment large pour augmenter la probabilité de réaction, à des énergies thermiques suffisamment hautes pour déclencher les réactions, avec un niveau d'isolation thermique suffisant. Les seuils des réactions de fusion imposent des énergies de l'ordre de 10 Kev (kilo-électron-volt, $10^8 K$ (degrés Kelvin)), largement au-dessus du seuil d'ionisation (10 ev). Dans ces conditions, la matière est dans l'état plasma, un ensemble d'ions et d'électrons libres qui interagissent via le champ électromagnétique. Pour parvenir à ces critères, deux approches sont principalement utilisées : le confinement dit inertiel et le confinement dit magnétique. La première approche utilise des lasers ou accélérateurs de particules pour compresser une bille de réactif à très forte densité pendant un très court instant. Le résultat est l'obtention d'une micro explosion

nucléaire. Pour être énergiquement rentable, cette méthode doit récupérer plus d'énergie de l'explosion qu'elle n'en a utilisé pour la compression. Pour être commercialement viable, il faudra aussi assurer un rythme d'explosions suffisamment rapide pour que la production d'énergie soit suffisante. La seconde approche utilise le fait que la matière chauffée à plusieurs millions de degrés (condition nécessaire au déclenchement des réactions) est ionisée. L'utilisation de forts champs magnétiques permet alors de contrôler la trajectoire de ces particules chargées et ainsi de créer une isolation extrêmement efficace du plasma. Plusieurs géométries de cage magnétique existent, les plus avancées sont les stellarators et les tokamaks (voir Fig. 1.1).

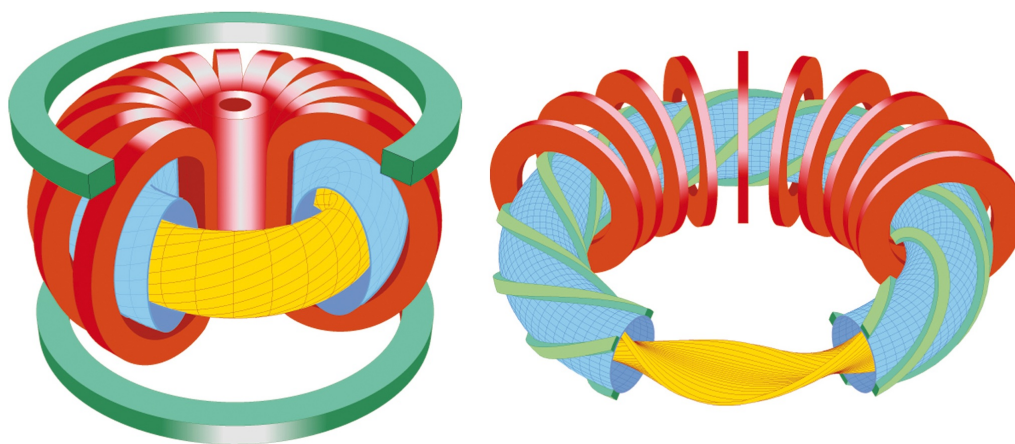


FIGURE 1.1 – Configuration magnétique d'un Tokamak (gauche) et d'un Stellarator (droite). En vert : bobines de champ poloidal pour le tokamak, bobines de champ hélicoïdal pour le stellarator ; en rouge : bobines de champ toroidal ; en bleu : mur de la chambre à plasma ; en jaune : surface magnétique générée par les bobines. La géométrie d'une surface magnétique d'un tokamak est torique alors que celle d'un stellarator est plus complexe. Source : Max Planck Institut für Plasmaphysik

Les technologies utilisées actuellement pour générer la cage magnétique confinant le plasma sont des bobines de matériaux supra conducteurs qui doivent être refroidis à des températures proches du zéro absolu $\sim 2 - 5 \text{ K}$. Le cœur du plasma, chauffé à plusieurs centaines de millions de degrés kelvin (dix fois plus chaud que le cœur du Soleil), se tient à des distances de l'ordre du mètre par rapport aux bobines. Maintenir un tel gradient de température démontre la très haute performance d'isolation du champ magnétique des tokamaks.

1.2 Dégradation du confinement par la turbulence

La qualité de l'isolation du plasma, donc de son confinement, détermine directement la performance de la machine. Tous les phénomènes conduisant à une détérioration du confinement doivent être contrôlés pour augmenter la performance du réacteur. Parmi ces phénomènes, les plus importants sont le transport de chaleur et de matière. Ce transport

se fait essentiellement de deux façons : par diffusion (mouvement aléatoire des particules) et par convection (mouvement organisé d'un groupe de particules). Dans les phénomènes de transport de systèmes thermodynamiques sans forçage d'un écoulement, la description usuelle du transport est un processus diffusif. Il apparaît cependant que les phénomènes d'auto-organisation conduisent à un transport convectif particulièrement efficace. Dans les plasmas de fusion l'origine du processus d'auto-organisation est associé à des instabilités, elles-mêmes à l'origine d'une turbulence analogue par bien des points à la turbulence atmosphérique. Ce caractère turbulent va de pair avec une nature chaotique des événements : le moindre changement des conditions initiales du système changera complètement l'évolution du système. Ce changement obéit toujours aux mêmes lois de la Physique mais rend difficile la caractérisation d'un tel système par des études autres que statistiques : la prédiction précise est difficile mais le comportement moyen est connu. Par rapport aux fluides neutres, l'étude de la turbulence plasma soulève deux questions : quel est le degré de turbulence, c'est-à-dire le nombre de Reynolds équivalent, et quelle est la conséquence de la faible collisionnalité des plasmas ? Dans ces derniers il est alors difficile de définir la viscosité et donc le nombre de degrés de liberté associé au système. Par ailleurs, une description cinétique devient nécessaire ce qui reflète la difficulté à définir le comportement d'une particule fluide.

1.3 La simulation numérique au cœur de la fusion

Les simulations numériques prennent une place toujours croissante dans nos sociétés. Avec l'essor de l'informatique et la croissance exponentielle des moyens de calcul, elles sont présentes dans de nombreux domaines de la Science et de l'Ingénierie comme la biologie, la sociologie ou la physique. Le pouvoir prédictif de cette démarche permet d'optimiser le recours à l'expérience réelle ou au prototypage, tout en améliorant la compréhension de phénomènes complexes. Alors que la mise au point des premiers réacteurs à fission s'est faite en accumulant un savoir empirique très important, les recherches actuelles en fusion contrôlée sont fortement impliquées dans l'utilisation des simulations et des mathématiques appliquées pour développer et tester une compréhension théorique de la dynamique des plasmas. Parallèlement l'approche expérimentale est restreinte à quelques dispositifs dont il est attendu une production scientifique en synergie avec les simulations numériques. La turbulence étant au cœur des phénomènes de transport, et donc de l'opération comme des performances des grands dispositifs comme ITER, la simulation de ce phénomène est un enjeu important de la compétition scientifique internationale. Par ailleurs, la complexité du phénomène qu'est la turbulence, les larges échelles d'espace, du millimètre au mètre, et les larges échelles de temps, de la micro seconde à la seconde, mises en jeu pour la décrire font qu'il est nécessaire d'utiliser des méthodes numériques avancées pour pouvoir la simuler.

1.4 Sujet de thèse : vérification de codes, réduction de modèles pour la turbulence

Aujourd’hui, le développement de codes de calcul est une activité qui nécessite une collaboration étroite entre des experts en mathématiques, physique et informatique. La complexité des outils a fortement augmenté avec celle des architectures de calcul. Les coûts en temps de calcul croissent à mesure que la physique étudiée devient de plus en plus exigeante. Dans ce paysage en évolution rapide, deux aspects apparaissent comme cruciaux : d’une part, la confiance en ces outils complexes et, d’autre part, une utilisation optimale des moyens humains et matériels. A cette fin, des procédures de vérification sont indispensables. Le développement d’un outil de simulation pendant ma thèse m’a confronté à ces problèmes. Bien que je ne prévoyais pas de m’y consacrer dans mes projets initiaux, je me suis résolu à développer une nouvelle méthode de vérification qui réponde à mes besoins : la méthode PoPe (Projection on Proper elements). La première partie de ma thèse est dédiée à la présentation de cette méthode, présentée chapitre 2, en utilisant la vérification du code de turbulence fluide TOKAM2D comme illustration.

L’objectif initial de ma thèse était la comparaison de l’approche cinétique et de la réduction fluide du transport turbulent. J’ai fait le choix de généraliser cette question à la réduction de modèles, considérant l’approche fluide comme une des possibilités de modèle réduit de l’approche cinétique. J’ai pour cela étendu la méthode PoPe, non plus dans un but de vérification, mais dans le but de déterminer des modèles réduits. La qualité d’un modèle réduit se mesure en comparant la dynamique qu’il permet avec la dynamique du modèle complet. Cette problématique plus générale s’appuie sur la possibilité de quantifier la performance de modèles réduits afin de reconsidérer le cycle logique qui unit la compréhension des expériences de physique et la formulation de modèles réduits pour la simulation et le contrôle. Pour la problématique de la réduction, il est devenu apparent avec PoPe qu’il fallait poser le problème sous forme d’un équilibre entre les éléments de physique que l’on souhaite préserver (et donc ceux que l’on accepte de perdre) par rapport à un objectif précis qui peut être une efficacité numérique ou une valeur pédagogique. Des réductions de modèle sont réalisées sur le code TOKAM2D au chapitre 3 ainsi que sur le code de turbulence cinétique basse fréquence TERESA au chapitre 5.

La dernière piste explorée avec la méthode PoPe est la qualification de modèle, c’est-à-dire la recherche d’équations dans des données expérimentales. En fin de chapitre 2, un essai est réalisé en utilisant des données artificiellement bruitées issues du code TOKAM2D.

Le chapitre 3 est dédié à l’étude de la turbulence de bord au moyen de simulations issues du code TOKAM2D. Après avoir présenté le modèle utilisé, une première étude est réalisée sur l’impact du chaos pour les simulations numériques. Une seconde étude sur le lien entre le degré de chaos d’un système et l’efficacité de son transport est effectuée.

Le chapitre 4 présente l'outil de simulation que j'ai développé pendant ma thèse, le code cinétique de turbulence basse fréquence TERESA. Après avoir présenté le modèle implémenté, les méthodes numériques et l'architecture de l'outil sont présentées avant de vérifier le code avec la méthode PoPe.

Enfin, le chapitre 5 explore une particularité du code TERESA, la présence de deux organisations exclusives du système simulé, l'une permettant un fort transport, l'autre empêchant tout transport. En étudiant l'origine de ce comportement très raide, j'ai identifié deux aspects de la physique du modèle où une simplification moins forte a permis de retrouver une dynamique intermittente.

Vérification de codes et Réduction de modèles : Projection on Proper elements

Sommaire

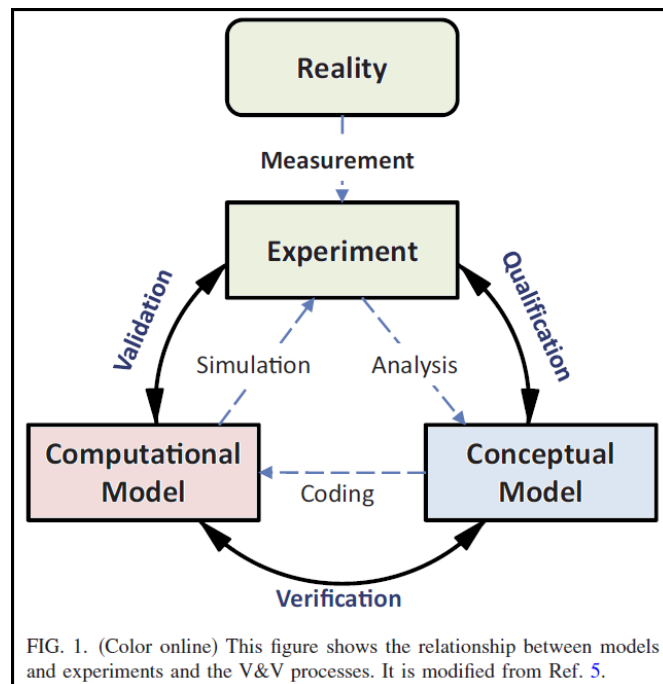
2.1	Vérification et Validation de codes : qualité numérique	8
2.2	La finitude : source d'erreur en sciences numériques	12
2.2.1	La finitude de la convention de stockage	12
2.2.2	Les approximations nécessaires aux méthodes numériques	12
2.2.3	Les erreurs dans le code source	12
2.2.4	Les erreur issue de l'environnement d'exécution	13
2.3	Limites des outils traditionnels de vérification	13
2.3.1	Analyse linéaire : relation de dispersion	13
2.3.2	Étude des invariants d'un système	16
2.3.3	Method of Manufactured Solutions	17
2.4	Principes de la "Projection On Proper Elements"	18
2.5	Formulation théorique de PoPe	19
2.5.1	Nature et unicité d'une équation	19
2.5.2	Prise en compte d'un terme d'erreur	20
2.5.3	Restrictions imposées par la discrétisation d'une équation	21
2.5.4	Formalisme complet de la méthode PoPe	23
2.5.5	Mise en évidence d'une équation dans une simulation	26
2.6	Procédure pour la mise en place de PoPe	29
2.6.1	Modification de code sources, manipulation de boîtes noires	29
2.6.2	Développement des post-traitements de PoPe	29
2.7	Compréhension et traitement des résultats de PoPe	31
2.7.1	Étude du poids des équations, $\tilde{\alpha}$	32
2.7.2	Étude du résidu des équations, ϵ	36
2.7.3	Procédure de vérification de code	39
2.7.4	Vérification du code TOKAM 2D	40
2.7.5	Procédure de réduction de modèles	48
2.7.6	Vers l'interprétation de données expérimentales	49

2.1 Vérification et Validation de codes : Procédure de qualité dans les sciences numériques

De la même façon que nous étalonnons un dispositif de mesure ou que nous vérifions les spécifications d'un outil de production, il est nécessaire de garantir la qualité des simulations numériques qui nous assistent aujourd'hui dans de nombreux domaines sensibles. Des efforts importants ont été entrepris en dynamique des fluides par l'industrie aérospatiale [Oberkampf 2002, Oberkampf 2004]. La description du processus de Vérification et Validation (V&V) qui en découle fut ensuite intégrée par d'autres communautés comme la physique des plasmas en la personne de Martin Greenwald [Greenwald 2010] qui décrit ces deux composantes :

- « Verification is an essentially mathematical demonstration that a chosen physical model, rendered as a set of equations, has been accurately solved by a computer code. Verification assesses the degree to which simulations correctly implement a physical "conceptual" model. »
- « Validation is a physical process which attempts to ascertain the extent to which the model used by a code correctly represents reality within some domain of applicability, to some specified level of accuracy. Validation assesses the degree to which a physical model captures "reality" through comparison to experimental measurements. »

FIGURE 2.1 – Diagramme de Qualification-Validation-Vérification issu de [Greenwald 2010], recoloré pour introduire le diagramme Fig. 2.2.



Le diagramme Fig. 2.1 place la validation comme un lien entre une expérience "réelle" et un code, alors que la vérification est située entre un code et un modèle physique conceptuel. Les ensembles "Computational Model" et "Conceptual Model" me semblent trop généraux pour illustrer finement les processus de Vérification et Validation.

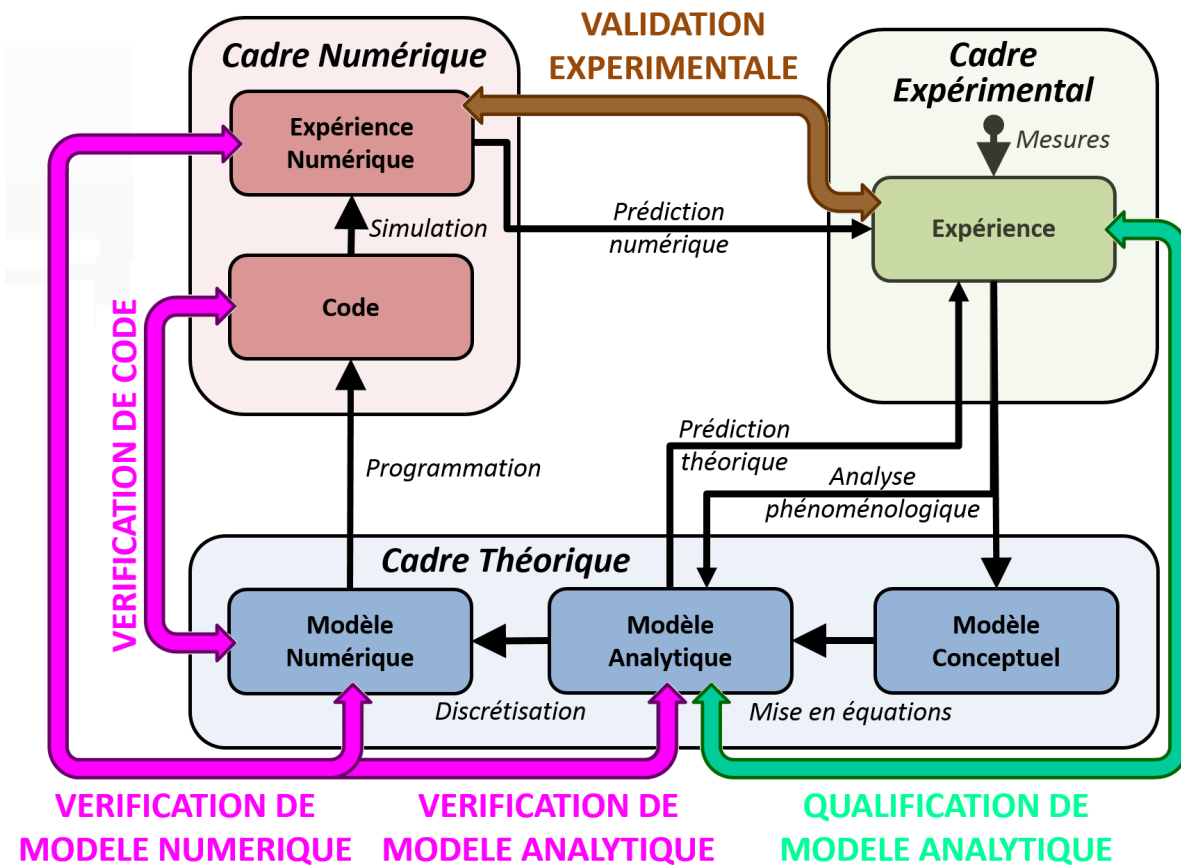


FIGURE 2.2 – Mise en évidence du processus de vérification et validation (V&V) autour de l'expérience numérique et de l'expérience "réelle". Flèches violettes : vérifications, flèche verte : qualification, flèche marron : validation. Bloc vert : cadre expérimental (réalité), bloc bleu : cadre théorique (physique et mathématiques), bloc rouge : cadre numérique (informatique). PoPe permet la vérification, la réduction et la qualification.

Sur la figure 2.2 je choisis de détailler "Conceptual Model" en trois entités : "Modèle Conceptuel", "Modèle Analytique" et "Modèle Numérique". Un Modèle Conceptuel n'est donc pas une équation mais un processus, une idée, voire un phénomène tel que l'hystérésis, une avalanche ou un système proie-prédateur. L'expérimentateur décrira ces phénomènes. Un Modèle Analytique est la traduction d'un phénomène en équations mathématiques. Ces équations ne sont pas nécessairement uniques, plusieurs ensembles d'équations sont capables de modéliser le concept d'hystérésis, en lien ou non avec des équations fondamentales. Par exemple, le système proie-prédateur peut s'inscrire dans la thermodynamique ou la physique statistique alors que dans la modélisation de la biomédecine, un tel cadre n'existe pas. C'est au théoricien de trouver la bonne formule pour capturer le phénomène étudié. Le dernier modèle est le Modèle Numérique. C'est la traduction en terme de mathématiques appliquées du Modèle Analytique. Le numéricien choisit la méthode la plus adaptée pour capturer la physique à décrire avec la meilleure précision et le moindre coût. Le dernier ajout par rapport au diagramme Fig. 2.1 est le bloc "Cadre numérique" qui est un monde alternatif au "Cadre expérimental", dans lequel l'application de lois est confiée à des codes informatiques.

Cette nouvelle décomposition permet de mettre en évidence différentes relations de vérifications et validations :

- La vérification de code, à proprement parler, se fait entre le modèle analytique le plus proche du code (dans notre cas le modèle numérique) et le code lui-même. Cette procédure est générale dans le domaine de l'informatique. Des méthodes et outils comme l'assistant de preuve Coq [Coq] ou les outils de vérification comme Krakatoa et Jessie [Kra] permettent de vérifier un code général. Le but est de garantir l'absence de bogue et non la pertinence du modèle implémenté. Un lancement d'Ariane 501 a explosé pour un bogue.
- la vérification de modèle analytique est la vérification communément réalisée. Un comportement est prédit à partir du modèle analytique et doit être retrouvé dans l'expérience numérique. Si ce comportement est observé, le cadre de résolution analytique des équations et le code sont considérés comme vérifiés dans le régime restreint de l'observation effectuée. Souvent, cette vérification partielle est prise comme une vérification totale et la restriction au régime effectivement vérifié est implicitement étendue.
- la vérification de modèle numérique est une étape intermédiaire entre la vérification de code et la vérification de modèle analytique. Elle est justifiée par le fait qu'un code peut être dépourvu de bogue par rapport au modèle numérique et au modèle analytique mais ne reproduit cependant pas un résultat analytique attendu. Cette situation peut venir du choix des méthodes numériques et de la discrétisation. En effet, le passage au modèle numérique peut être considéré comme une projection. Il faudra utiliser un filtre P_v qui décompose l'erreur observée en une erreur intrinsèque à la méthode numérique et un éventuel bogue.
- la qualification de modèle est basée sur un ensemble de critères théoriques permettant de construire ou d'invalidier un modèle analytique par rapport à un ensemble de données expérimentales.
- la validation de code est l'étape qui valide la qualification de modèle et la vérification de code. L'objectif est de comparer des données issues d'une expérience numérique et des données issues d'une expérience "réelle". L'accord parfait entre les deux ensembles est peu probable, cette étape repose donc sur une liste de critères à valider qui correspond au comportement que l'outil de simulation doit être capable de reproduire.

La méthode "Projection on Proper elements" (PoPe) présentée dans ce chapitre permet de diagnostiquer les relations de vérification de modèle numérique et vérification de modèle analytique afin d'établir un degré de vérification de code. Ces vérifications sont réalisées sans hypothèse sur les modèles testés. La validation de discrétisation (essentiellement l'écart entre la vérification de modèle analytique et modèle numérique) est aussi assurée par PoPe. La validation de modèle est actuellement explorée. Toutes ces vérifications et validations permettent de garantir la qualité d'un outil de calcul. La précision des diagnostics de PoPe facilite la localisation de bogues, définit clairement un régime de

fonctionnement optimal et permet d'ouvrir des pistes d'améliorations en pointant les faiblesses d'un outil. Ceci est accompli pour un coût en temps humain et en temps de calcul minimal. Pour illustrer cette méthode, le code TOKAM2D (Rayleigh-Bénard fluide) et le code TERESA (Rayleigh-Bénard cinétique) sont utilisés. Le premier a été choisi car c'est un modèle simple mais avec une dynamique riche, typique de la turbulence plasma (auto-organisation, avalanches ...) tout en étant rapide et précis grâce à son approche pseudo-spectrale. Le second code, basé sur une méthode semi-lagrangienne, apporte les problématiques classiques des études cinétiques (l'absence de termes contrôlant les petites échelles, la résolution limitée par l'occupation mémoire).

Après avoir introduit les différents types d'erreurs présentes dans une simulation numérique, une brève description de méthodes couramment utilisées pour la vérification est effectuée. La méthode PoPe est ensuite présentée en plusieurs étapes : les principes de la méthode, sa formulation théorique, sa mise en place pour un code et l'interprétation des résultats qu'elle génère. L'annexe C généralise cette méthode afin de la comprendre plus en profondeur.

Le code TOKAM2D est directement utilisé dans ce chapitre pour illustrer la méthode PoPe. Une brève introduction du modèle implémenté est réalisée. Les équations portent sur trois inconnues $N(x, y, t)$ (densité), $\phi(x, y, t)$ (potentiel électrique) et $W(x, y, t)$ (vorticité). Le plan (x, y) est slab et bi-périodique. Il est transverse aux lignes de champ magnétique dans le plasma périphérique des tokamaks.

$$\partial_t N + [\phi, N] - D\Delta N = -\sigma N e^{\Lambda - \phi} + S \quad (2.1)$$

$$\partial_t W + [\phi, W] - \nu\Delta W + g\partial_y \log(N) = \sigma(1 - e^{\Lambda - \phi}) \quad (2.2)$$

$$W = \Delta\phi \quad (2.3)$$

L'équation (2.1) est un bilan de conservation de la masse. L'équation (2.2) est un bilan de conservation de la charge. L'équation (2.3) permet de déduire le potentiel électrique à partir de la vorticité. Le terme source S est choisi gaussien $S(x, y) = \exp(-(x - x_S)^2/L_S^2)$, il est donc constant en temps et dans la direction y avec une forte localisation en x . Enfin, le terme $[g, f]$ est un crochet de Poisson tel que $[g, f] = \partial_x g \partial_y f - \partial_y g \partial_x f$. Pour plus d'information sur la signification de ces équations, voir le chapitre 3. Nous précisons seulement que D , ν , g , σ et Λ sont des scalaires utilisés pour tenir compte, respectivement, de la diffusion de la densité, de la diffusion de la vorticité, de la courbure, des pertes parallèles et établir un potentiel électrique de référence.

2.2 La finitude : source d'erreur en sciences numériques

Avant de vérifier un code, il est intéressant de connaître les erreurs que nous recherchons. Certaines sont inévitables mais minimales, d'autres peuvent et doivent être corrigées. Je distingue quatre types d'erreurs.

2.2.1 La finitude de la convention de stockage

Le premier type d'erreurs est inhérent à la représentation d'information sur un ordinateur. Le stockage de l'information en binaire ne permet pas d'écrire l'ensemble des nombres de \mathbb{R} . Même avant le premier calcul, une simulation est ainsi entachée d'erreurs lors de sa discrétisation dans l'espace (nombre fini de degrés de liberté) et son estimation en binaire (précision finie des degrés de liberté). Par la suite, le résultat de chaque opération mathématique nécessitera probablement un nouvel arrondi avant d'être stocké en mémoire.

2.2.2 Les approximations nécessaires aux méthodes numériques

Le second type d'erreurs vient des méthodes utilisées en mathématiques appliquées. Elles introduisent généralement des approximations pour estimer des fonctions (du fait du nombre fini de degrés de liberté). Par exemple, le calcul d'une dérivée par différences finies fait appel à une hypothèse de régularité polynomiale d'ordre n au voisinage d'un point. Sauf dans le cas d'une fonction polynomiale d'ordre n , le calcul de la dérivée ne peut être qu'approximatif. Chaque méthode numérique va de pair avec une liste d'hypothèses qui permettent d'encadrer l'erreur commise. Ces prérequis prennent la forme de contraintes sur les discrétisations utilisées, les durées maximales de simulations ou la dynamique du système simulé (vitesse maximale de propagation, gradients maximums ...). Le comportement du système simulé est un élément clef pour estimer l'erreur. Or, dans de nombreux cas, l'utilisateur ne connaît pas ce comportement avant de l'avoir simulé. Certaines méthodes de calcul explosent avant de s'arrêter lorsque le pas d'intégration temporelle Δt est trop grand (condition de Courant–Friedrichs–Lewy "numérique"), alors que d'autres continuent de fournir des résultats, parfois vraisemblables, mais ne respectant pas le modèle théoriquement implémenté dans le code. Il faut veiller à utiliser un code dans un régime où les méthodes numériques convergent asymptotiquement, selon l'ordre de leur schéma $\mathcal{O}(\Delta t^m \Delta x^n \dots)$. Le cumul des différentes erreurs ne devrait pas impacter les chiffres significatifs du résultat recherché. L'utilisateur doit s'en assurer car le programmeur n'a pas nécessairement pris le temps de mettre en place des garde-fous.

2.2.3 Les erreurs dans le code source

Le troisième type d'erreurs vient du programmeur. Il est coûteux de garantir l'absence de bogues dans un code de plusieurs milliers de lignes. Une documentation détaillée n'empêche pas une erreur d'inattention... Certains bogues nécessitent un contrôle total de l'environnement d'exécution (directives MPI ou Open MP) pour être reproductibles. Et

comme pour certaines méthodes numériques utilisées en dehors de leur domaine d'application, une erreur de logique peut être présente sans clairement se manifester. Pour éviter les erreurs de ce type, il faudrait effectuer des tests unitaires sur chacune des fonctionnalités codées. Cette tâche fastidieuse est souvent réservée aux logiciels critiques (logiciels embarqués en aéronautique, bientôt les pilotes automatiques de nos voitures, etc.).

2.2.4 Les erreurs issues de l'environnement d'exécution

Enfin, le quatrième type d'erreurs vient de l'environnement d'exécution du programme. Ce sont les possibles bogues d'une bibliothèque ou d'un pilote voire des soucis au niveau matériel. Au niveau électronique, un bit peut changer de valeur spontanément sans faire stopper la machine. Différents mécanismes d'ECC (Error-correcting code) peuvent détecter et corriger une partie de ces erreurs. Aujourd'hui, les plus grands calculateurs du top 500 contiennent plus d'un million de cœurs, soit plus de 10^{13} transistors. La probabilité d'une panne matérielle falsifiant et/ou stoppant l'exécution augmente avec la taille du calculateur. Des outils de tolérance aux pannes sont en cours de développement [Bautista-Gomez 2011].

La méthode "Projection on Proper elements" (PoPe) est capable de détecter ces quatre types d'erreurs. Seule l'application aux erreurs issues des approximations numériques et aux erreurs dans le code source est décrite dans ce chapitre. L'étude des erreurs dues à la finitude de la convention de stockage peut se faire en choisissant une convention de stockage de l'information plus précise dans l'étude PoPe que dans le code étudié. La bibliothèque CADNA [Christophe Denis 2012] est un outil dédié à la propagation de telles erreurs. Concernant les erreurs dues à l'environnement d'exécution, le fait de détecter une erreur matérielle non fatale et qui impacte la dynamique de la simulation est ici jugé suffisant.

2.3 Limites des outils traditionnels de vérification

En turbulence plasma (généralement équations aux dérivées partielles non linéaires), il existe plusieurs méthodes largement utilisées pour indiquer les propriétés d'un code. Nous présentons les trois qui font référence : l'étude linéaire, l'étude des invariants et la méthode des solutions manufacturées (Method of Manufactured Solutions MMS).

2.3.1 Analyse linéaire : relation de dispersion

Une première méthode est l'analyse linéaire de la relation de dispersion d'équations représentant une instabilité. Sous certaines hypothèses permettant la linéarisation, une relation de dispersion établit la nature stable ou instable d'une perturbation associée à un équilibre par le calcul du taux de croissance et la pulsation d'un mode propre donné. Cette méthode peut demander un travail analytique important mais elle apporte de précieux éléments de compréhension physique et numérique. Plusieurs limitations de

cette méthode peuvent être analysées. Il est souvent difficile de mesurer des taux de croissance (et décroissance) lorsqu'ils sont faibles sans avoir recours à des modifications fondamentales du code telles que des procédures de filtrage de modes [Lapillonne 2010]. Les simulations utilisées pour vérifier le code sont des simulations clairement dédiées à la vérification. Elles sont rarement utilisées pour produire des résultats physiques sur la micro-turbulence car ces études sont principalement faites dans des régimes où les non-linéarités jouent un rôle important via des phénomènes d'auto-organisation. De plus, une analyse linéaire ne saurait pleinement vérifier le comportement en phase non-linéaire de par l'ensemble des hypothèses effectuées (surtout si un filtre est utilisé pour forcer la linéarisation). En effet, différents systèmes peuvent, une fois linéarisés, se comporter de façon similaire : l'analyse linéaire n'est pas exhaustive.

L'ensemble des hypothèses nécessaires à la linéarisation simplifie souvent la géométrie. Dans le cas de TOKAM2D, une des hypothèses affirme que le gradient moyen est constant dans l'ensemble de la boîte de simulation. Elle conduit à une solution linéaire qui n'est pas une solution stationnaire, ce qui complique la séparation d'échelle entre l'équilibre et la perturbation. De plus, la perturbation choisie n'a pas les mêmes propriétés sur l'ensemble de la boîte de simulation car l'ensemble de la boîte de simulation ne correspond pas au cadre hypothétique fixé pour l'étude analytique. Un mode de Fourier n'est pas un mode propre mais cette décomposition est choisie car elle simplifie l'analyse. La relation de dispersion linéaire de TOKAM2D est :

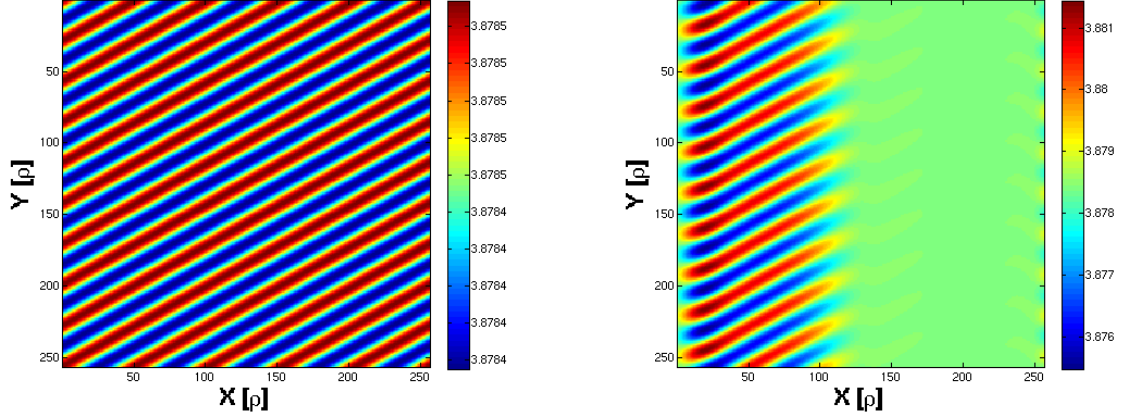
$$-k^2(i\omega - Dk^2 - \sigma)(i\omega - \frac{\sigma}{k^2} - \nu k^2) + igk_y\sigma - gk_y^2L_n = 0 \quad (2.4)$$

Avec $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, ω la pulsation. La perturbation et l'équilibre sont définis par :

$$\begin{pmatrix} \tilde{n} \\ \tilde{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{n}_{k_x, k_y} \\ \tilde{\phi}_{k_x, k_y} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-i\omega t} \quad ; \quad \bar{\phi} = 0 \quad ; \quad \bar{n}(x) = \frac{F_A \lambda}{D} \cosh\left(\frac{X - x}{\lambda}\right)$$

Le paramètre L_n définit la longueur de gradient, constante dans l'ensemble de la boîte.

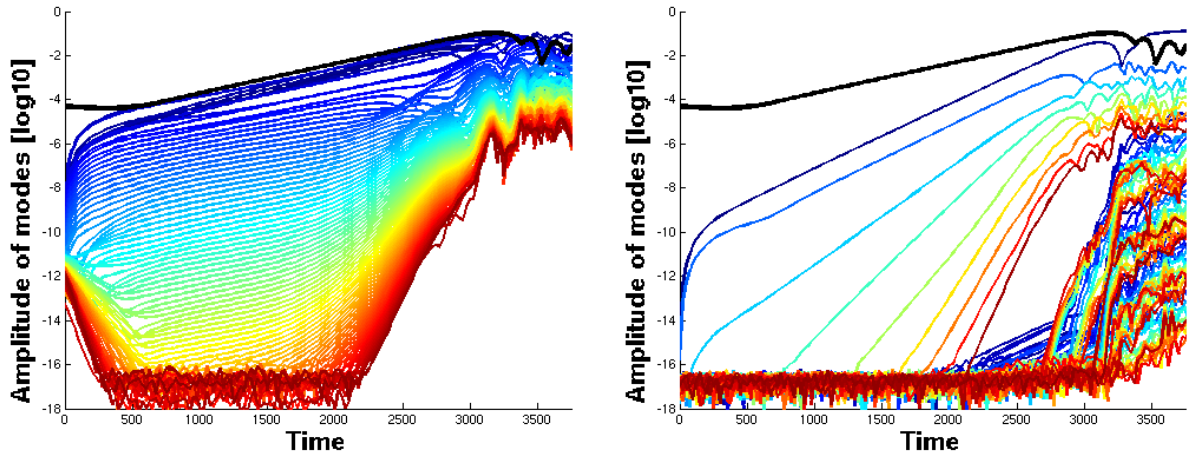
Sur la Fig. 2.3, on peut voir la perturbation initiale (Fig. 2.3a) qui se projette sur les modes propres les plus proches et en l'occurrence certains modes instables (Fig. 2.3b). En effet si $\tilde{n} = \alpha\delta n_1 + \beta\delta n_2$ avec δn_1 évanescant et δn_2 instable, alors la perturbation va évoluer en faisant disparaître δn_1 et en faisant croître δn_2 : $\tilde{n}(t) = \alpha\delta n_1 e^{-\gamma_1 t} + \beta\delta n_2 e^{+\gamma_2 t}$. Cette évolution est aussi visible sur la figure 2.4 où le taux de croissance du mode initialement injecté ($n_x = k_x/(2\pi) = 5, n_y = k_y/(2\pi) = 9$) n'est pas constant dès l'instant initial. S'il y a plusieurs modes instables dans la projection, la sélection du mode le plus instable n'est pas immédiate.



(a) Potentiel électrique initial perturbé
 $\phi(x, y, t = 0) = \varepsilon \sin(k_x x + k_y y)$,
 $k_x/(2\pi) = 5$, $k_y/(2\pi) = 9$

(b) Réorganisation du potentiel électrique à
 $t = 1250 \omega_0^{-1}$, dans la phase linéaire. Localisation de l'instabilité

FIGURE 2.3 – Illustration de la réorganisation dans l'espace réel d'un mode de Fourier (perturbation initiale) sur un mode propre. La périodicité impose l'existence d'une zone stable et une zone instable.



(a) Amplitude des modes de Fourier
 $(n_x = [1 : 83], n_y = 9)$ au cours du temps.
 Mode $(n_x = 5, n_y = 9)$ en noir.

(b) Amplitude des modes de Fourier
 $(n_x = 5, n_y = [1 : 83])$ au cours du temps.
 Mode $(n_x = 5, n_y = 9)$ en noir.

FIGURE 2.4 – Illustration de la réorganisation dans l'espace de Fourier d'un mode de Fourier (perturbation initiale) sur le mode propre le plus instable dans le système. Trois régimes sont visibles : phase de réorganisation, phase de croissance linéaire, phase non linéaire.

Trois régimes sont discernables dans la figure 2.4 :

- 1) sur l'intervalle $t = [0, 500]$ une réorganisation forte et rapide de la perturbation ($n_x = 5, n_y = 9$) impacte les modes ($n_x = [1 : 83], n_y = 9$) (Fig. 2.4a).
- 2) sur l'intervalle $t = [500, 1500]$ la perturbation (composée d'un ensemble de modes de Fourier) croît de façon exponentielle avec un taux de croissance qui correspond à celui prédit par la relation de dispersion eq.(2.4). Des couplages non linéaires font apparaître les harmoniques du mode ($n_x = 5, n_y = 9$) (Fig. 2.4b). Une fois qu'ils sont apparus, ces modes gardent une croissance typiquement exponentielle.
- 2 bis) sur l'intervalle $t = [1500, 3000]$, un changement du taux de croissance des modes ayant un grand nombre d'onde s'opère (les modes ($n_x \neq 5, n_y = 9$)) alors que le mode le plus instable linéairement ($n_x = 5, n_y = 9$) garde une croissance qui semble exponentielle.
- 3) sur l'intervalle $t = [3500, +\infty]$ le système est en régime pleinement non-linéaire, il y a saturation des amplitudes.

2.3.2 Étude des invariants d'un système

Un second indicateur de la qualité d'un code est la mesure d'invariants tels que la quantité de matière présente dans le système ou l'énergie totale du système. Ces deux grandeurs doivent être conservées modulo les interactions avec la source, les puits et les flux aux limites du domaine. Les diagnostics de ces grandeurs ainsi que leurs différentes composantes (énergie potentielle, énergie cinétique, etc.) sont importants pour comprendre le phénomène physique étudié, au-delà de la vérification du code. Ces mesures peuvent être effectuées dans n'importe quel régime pour un coût similaire. De plus, ce sont des grandeurs qui peuvent être mesurées par des expérimentateurs à l'image du critère de Lawson [Lawson 1957]. La principale objection à cette méthode est qu'elle apporte une information partielle. Effectuer des bilans en intégrant une fonction de distribution sur plusieurs dimensions afin de calculer un scalaire donne un résultat forcément plus régulier et moins sensible que l'étude directe de la fonction de distribution. Des compensations d'erreurs numériques (surestimations et sous-estimations en différents endroits) ne sont pas détectées par le bilan. Enfin, un bilan ne peut pas différencier la dynamique des systèmes (2.5-2.6-2.7). Les trois systèmes peuvent conserver leurs invariants avec la même précision, mais si le programmeur a voulu coder l'équation (2.5) et non les équations (2.6) ou (2.7), un bilan ne le détectera pas.

$$\partial_t f(x, y, E) = -[\phi, f] - \omega \partial_y f \quad (2.5)$$

$$\partial_t f(x, y, E) = +[\phi, f] - \omega \partial_y f \quad (2.6)$$

$$\partial_t f(x, y, E) = -[\phi, f] - 2\omega \partial_y f \quad (2.7)$$

L'utilisation de sources ou de puits complique la mesure des bilans car l'historique du système est nécessaire pour interpréter le test d'invariance. Les diagnostics des échanges avec l'extérieur du système doivent être précis pour ne pas ajouter une source d'erreur qui ne dépendrait pas du moteur de calcul du code.

2.3.3 Method of Manufactured Solutions

La dernière méthode présentée est la méthode des solutions manufacturées [Salari 2000, Roache 2001, Riva 2014] (Method of Manufactured Solutions MMS). Son principe est de contraindre le système simulé en utilisant des sources et/ou puits dans le but de faire évoluer le système vers une solution cible. Les sources et puits sont analytiquement déterminés selon la solution cible choisie. Cette solution cible peut dépendre de l'espace et du temps, elle ne doit pas nécessairement être une solution du système initial. Soit une version simplifiée de l'équation eq.(2.1) :

$$\partial_t N + aN\partial_x N - D\partial_x^2 N = 0 \quad (2.8)$$

$$\partial_t N - \mathcal{L}(N) = 0 \quad (2.9)$$

Soit $N_S = A\sin(x + Bt)$ la solution cible choisie, alors le terme à ajouter à l'équation eq.(2.8) est le suivant :

$$\partial_t N_S + aN_S\partial_x N_S - D\partial_x^2 N_S = (B + aA\sin(x + Bt))\cos(x + Bt) + DA\sin(x + Bt) = \mathcal{S}_S \quad (2.10)$$

Ainsi, $N_S = A\sin(x + Bt)$ est bien solution du nouveau système eq.(2.11) qui est simplement l'équation eq.(2.8) forcée par la source eq.(2.10) :

$$\partial_t N + aN\partial_x N - D\partial_x^2 N = \mathcal{S}_S \quad (2.11)$$

En pratique, pour faciliter la vérification, la solution cible doit vérifier différentes propriétés : être choisie d'une régularité suffisante, ne pas être dans le noyau d'un opérateur (sinon il ne serait pas testé), etc. [Reston 1998, Patrick Knupp 2002]. Une contrainte qui ne me semble pas résolue à ce jour est le fait que la solution cible ne doit pas être dans un régime chaotique. En effet, le choix d'une cible asymptotiquement instable va impacter la convergence au risque de faire orbiter le système autour de la cible sans jamais l'atteindre [Wu 2011, Fullmer 2014]. Une équation d'évolution sera plus facilement vérifiée dans un régime non chaotique. Cette contrainte n'est pas présente sur les équations d'équilibre. Le principal avantage des MMS par rapport à l'analyse linéaire est qu'elles poussent la vérification du régime linéaire au régime non linéaire. Le prix à payer en termes de calculs analytiques préliminaires est comparable mais des modifications du code sont indispensables. La vérification reste partielle car elle se cantonne à des simulations qui ne seront pas utilisées pour faire de la production, contrairement à l'étude des invariants qui, n'étant pas intrusive, peut être utilisée en production. A moins de faire une étude extensive à l'aide des MMS, couvrant un large champ de solutions cibles et de discrétisations associées, il n'est pas possible de garantir que les méthodes numériques soient toujours utilisées dans un régime où elles convergent asymptotiquement. Enfin, comme pour l'analyse linéaire, toute modification du code demandera une nouvelle phase de vérification.

Les trois méthodes de vérification présentées possèdent des avantages et inconvénients différents. Elles peuvent nécessiter des simulations uniquement dédiées à la vérification ou s'employer sur des simulations de production. Elles peuvent être appliquées directement ou nécessiter un travail analytique et/ou informatique important. Elles peuvent être restreintes à des régimes non représentatifs des simulations de production ou être utilisables en toutes circonstances. Enfin, elles peuvent garantir une vérification partielle en détectant une erreur sans pouvoir l'attribuer à un élément précis. Malheureusement, tous les avantages ne sont pas accessibles en utilisant une unique méthode. Par ailleurs, l'expérience montre que l'étape de vérification se traduit souvent par un temps long consacré à la vérification de la méthode elle-même, les désaccords pouvant venir d'une erreur du code aussi bien que des développements effectués pour le vérifier.

2.4 Principes de la "Projection On Proper Elements"

En micro-turbulence plasma, un code de simulation est généralement un outil qui fait évoluer une inconnue au cours du temps en respectant des lois physiques, c'est-à-dire un ensemble d'équations transcrites par les mathématiques appliquées et l'informatique en un outil de simulation numérique. La méthode "Projection On Proper Elements" (PoPe) est la recherche des équations effectivement utilisées par l'outil de simulation pour générer une série de données. En effet, on peut présupposer une bijection entre les données produites et les équations initiales du problème. Si les équations retrouvées sont "identiques" aux équations du modèle analytique, l'outil est vérifié. Retrouver les équations effectivement utilisées par un outil de simulation avec PoPe est une méthode générale, directe, non perturbative, non intrusive, économe, intégrée, exhaustive et facile à maintenir. Tout cela en mettant à disposition des outils puissants pour des analyses ultérieures.

Générale : Aucune hypothèse restrictive n'est utilisée dans la mise en place de PoPe ce qui permet de l'utiliser même dans des régimes non linéaires chaotiques, typiques de la turbulence plasma.

Directe : Il n'y a aucune étape intermédiaire comme la linéarisation d'équations ou la recherche de solutions analytiques.

Non perturbative : Le comportement du système simulé n'est pas impacté par une quelconque excitation car aucun opérateur n'est ajouté dans l'équation étudiée. Ceci permet d'utiliser PoPe directement sur des simulations de production.

Non intrusive dans sa mise en œuvre, car le moteur de calcul du code n'est pas modifié. Pour faciliter l'utilisation de PoPe, un diagnostic simple et léger est ajouté au code. PoPe peut aussi être utilisée sur un code "boîte noire". Le coût est une éventuelle augmentation de l'espace disque nécessaire pour l'utilisation de PoPe.

Économe : PoPe évite d'avoir recours à des simulations spécifiques à la vérification, alors que c'est le cas pour les MMS. De plus, le surcoût en temps de calcul de l'utilisation est de l'ordre de 1%.

Intégrée car elle prend en compte l'ensemble de l'environnement de travail. Toute la chaîne de production est testée, du fichier d'entrée du programme (spécifiant les paramètres des équations et l'état initial du système) jusqu'à l'environnement de post-traitement (Matlab / Python / etc.) qui est utilisé pour manipuler les diagnostics sauvegardés et dont les équations du code seront extraites (voir Fig. 2.8). Même une erreur dans la phase de lecture de la série temporelle par l'environnement de post-traitement sera détectée. La normalisation des variables, souvent spécifique au code, est également vérifiée. Ce point est très important car il représente un point névralgique lors de la comparaison de codes.

Exhaustive : Les résultats issus de PoPe permettent de vérifier les équations résolues par le code, l'ordre des méthodes numériques ainsi que la forme de l'erreur pour s'assurer que la précision nécessaire à l'étude est bien atteinte.

Facile à maintenir : L'ajout (ou le retrait) d'un opérateur dans le code étudié ne change pas le diagnostic PoPe embarqué dans le code et ne conduit qu'à modifier quelques lignes de la partie post-traitement de PoPe.

Prospective : Lors de l'étude des résultats, cette méthode permet de tester des réductions de modèle. Les outils de post-traitement de PoPe sont aussi applicables à la qualification de modèles (détermination d'un modèle théorique à partir de données expérimentales). Il est facile de mesurer des taux de croissance, des échanges d'énergie ou de quantifier l'impact de la discrétisation sur la source d'entropie. En déterminant la structure de l'erreur et les points faibles d'un outil de simulations, PoPe peut guider l'amélioration du code testé.

Ces avantages combinés permettent finalement un gain net en temps humain.

2.5 Formulation théorique de PoPe

PoPe est une méthode créée pour vérifier les systèmes d'équations aux dérivées partielles, largement utilisées en recherche théorique ou pour des applications industrielles. Dans ce manuscrit, elle est essentiellement utilisée pour vérifier des équations d'évolution mais s'applique aussi aux équations stationnaires. Sa formulation, à l'image de ses principes, est simple. Elle se décompose en peu d'étapes qui sont essentiellement des réflexions théoriques que l'on transforme en un système numérique. Cette procédure est illustrée sur le code TOKAM2D (dont la physique est étudiée dans le chapitre 3). Une généralisation de la méthode grâce à un formalisme alternatif est présenté annexe C.

2.5.1 Nature et unicité d'une équation

Pour mettre en évidence l'inconnue du problème considéré (ici les dérivées temporelles), les équations (2.1-2.2) deviennent (2.12-2.13) :

$$-\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{N}]}[\phi, N] + \mathbf{D}\Delta N + -\sigma N e^{\Lambda-\phi} + \mathbf{S}_0 \mathbf{S} = \partial_t N \quad (2.12)$$

$$-\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{W}]}[\phi, W] + \nu \Delta W + -g \partial_y \log(N) + \sigma(1 - e^{\Lambda-\phi}) = \partial_t W \quad (2.13)$$

Le poids de chaque opérateur apparait en caractère gras. Ils sont scalaires, constants en temps et espace. Les équations sont alors écrites sous la forme d'une somme d'opérateurs pondérés.

$$\sum_{i=1}^8 \alpha_{N,i} O_i(N, W, \phi) = \partial_t N \quad ; \quad \sum_{i=1}^8 \alpha_{W,i} O_i(N, W, \phi) = \partial_t W \quad (2.14)$$

Chacun des O_i est un des 8 opérateurs utilisés dans les équations (2.12 - 2.13). Ils définissent l'ensemble : $O = \{[\phi, N], \Delta N, Ne^{\Lambda-\phi}, \mathcal{S}, [\phi, W], \Delta W, \partial_y \log(N), (1 - e^{\Lambda-\phi})\}$ considéré comme un espace à 8 dimensions. Les poids associés sont ici :

$$\alpha_N = (-1_{[\phi, N]}, \mathbf{D}, -\sigma, \mathbf{S}_0, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}) \text{ et } \alpha_W = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, -1_{[\phi, W]}, \nu, -g, \sigma).$$

Une équation est définie par les opérateurs qu'elle utilise ainsi que les poids qui leur sont associés. Trouver un moyen de mesurer les traces de ces opérateurs dans les sorties d'une simulation doit donc permettre d'établir, a posteriori, quelles sont les équations effectivement utilisées lors de la simulation.

2.5.2 Prise en compte d'un terme d'erreur

Soit $\delta_t N$ et $\delta_t W$ les dérivées temporelles calculées à partir de séries temporelles de N et W , toutes deux issues d'une simulation de TOKAM2D. A priori $\delta_t N = \partial_t N + \varepsilon_N(x, y, t)$ et $\delta_t W = \partial_t W + \varepsilon_W(x, y, t)$ avec ε_N et ε_W l'erreur numérique commise par le code.

$$\delta_t N = \sum_{i=1}^8 \alpha_{N,i} O_i(N, W, \phi) + \varepsilon_N \quad \delta_t W = \sum_{i=1}^8 \alpha_{W,i} O_i(N, W, \phi) + \varepsilon_W \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^8 (\alpha_{N,i} + \delta \alpha_{N,i}) O_i(N, W, \phi) + \tilde{\varepsilon}_N &= \sum_{i=1}^8 (\alpha_{W,i} + \delta \alpha_{W,i}) O_i(N, W, \phi) + \tilde{\varepsilon}_W \\ &= \sum_{i=1}^8 \tilde{\alpha}_{N,i} O_i(N, W, \phi) + \tilde{\varepsilon}_N &= \sum_{i=1}^8 \tilde{\alpha}_{W,i} O_i(N, W, \phi) + \tilde{\varepsilon}_W \end{aligned} \quad (2.16)$$

Le terme $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \sum \delta \alpha_i O_i$ est construit pour ne pas dépendre linéairement des opérateurs O_i . Cette réécriture permet de mieux étudier l'erreur en capturant dans les $\tilde{\alpha}$ les surestimations et sous-estimations des opérateurs alors que les $\tilde{\varepsilon}$ contiennent l'erreur se projetant en dehors de l'ensemble des opérateurs $\{O\}$. Ici je nomme les $\tilde{\alpha}$ "poids de l'équation" : ce sont des vecteurs contenant autant d'éléments que d'opérateurs testés O_i . Que le modèle soit à 1 dimension ou 6 dimensions, chaque poids est un scalaire associé à un ensemble de $N_x \times N_y \times N_t$ points utilisés pour l'étude (points de l'espace (x, y, t)). Les $\tilde{\varepsilon}$ sont les "résidus" : ce sont des vecteurs contenant $N_x \times N_y \times N_t$ éléments. Ils s'expriment dans le même espace que les variables N , W et ϕ . Il y a un seul résidu $\tilde{\varepsilon}$ par équation, indépendamment du nombre d'opérateurs O_i . Dans ce formalisme, obtenir numériquement $(\tilde{\alpha}, \tilde{\varepsilon})$ à partir de séries temporelles de N , W et Φ revient à déterminer numériquement les équations effectivement implémentées dans un code comme TOKAM2D. Cette opéra-

tion est réalisée (section 2.5.5) en utilisant une projection basée sur un système linéaire, après avoir introduit correctement la restriction de la dynamique d'un système en accord avec sa discrétisation (section 2.5.3) et introduit le formalisme complet de PoPe (section 2.5.4).

2.5.3 Restrictions imposées par la discrétisation d'une équation

Un ordinateur dispose d'une puissance de calcul finie associée à une mémoire finie ainsi qu'une précision finie. Pour être efficace, PoPe doit tenir compte de ce point important. Cette finitude implique une limite sur la quantité d'information représentable.

2.5.3.1 Exemple de la série de Fourier

Par exemple, à partir d'un vecteur v à n composantes, il est possible d'associer une série de Fourier de n termes dont les modes minimum et maximum sont $-n/2$ et $+n/2-1$. Le mode $-n/2$ est un mode singulier car il n'y a pas de mode $+n/2$ qui serait son opposé, comme il en existe pour tous les autres modes à l'exception du mode 0. Le mode $+n/2$ correspond au vecteur d'onde de Nyquist $n_{Nyquist} = n/2$.

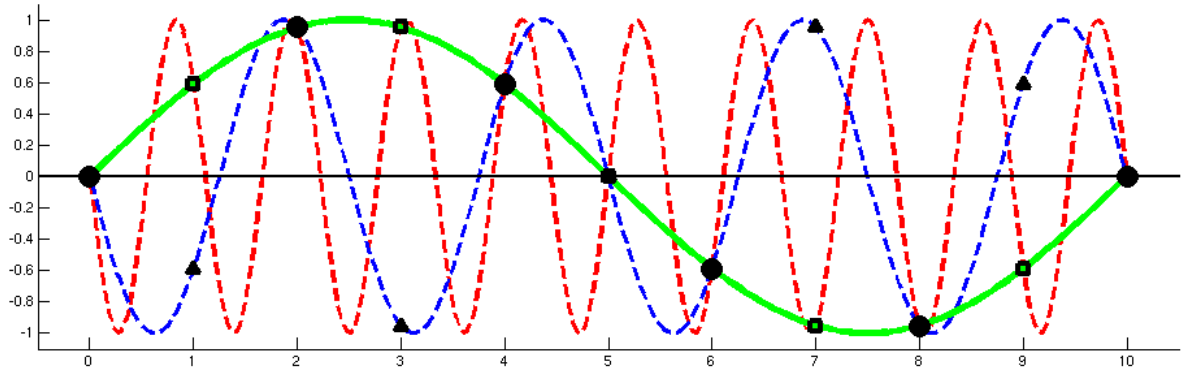


FIGURE 2.5 – Illustration du problème d'aliasing en utilisant trois sinusoïdes.

Vert trait plein : $\sin(2\pi x/10)$, bleu trait discontinu : $-\sin(4 \times 2\pi x/10)$, rouge trait discontinu : $-\sin(9 \times 2\pi x/10)$. Cercles pleins noirs : points d'intersection des courbes verte, bleue et rouge. Carrés noirs : points d'intersection des courbes verte et rouge. Triangles noirs : position de la courbe bleue lorsque les courbes rouge et verte s'intersectent.

Il existe un problème de bijection / d'unicité de solution lors du passage de la série de Fourier à l'espace réel et inversement. Ce problème est connu comme le phénomène de repliement de spectre (ou aliasing) [Orszag 1971]. Un mode n_1 n'est pas discernable d'un mode n_2 si $n_1 = n_2 \bmod(n)$. Si un mode $n - 1$ est présent dans le vecteur v , il ne sera pas détecté en tant que tel mais comme un mode -1 . De plus, un mode $2n - 1$ sera aussi détecté en tant que mode -1 (voir Fig. 2.5 pour $n = 5$). Pour éviter ce phénomène il faut limiter la projection aux modes inférieurs à la limite de Nyquist. Cette limite est forte car une équation non linéaire va généralement enrichir son spectre dans l'espace de Fourier, indépendamment de la méthode numérique utilisée. Soit $G(x, y, t) = g(t)\sin(qx + ry)$ et

$H(x, y, t) = h(t)\sin(ox + py)$ injectés dans l'équation eq.(2.1) sans source et puits, alors dès l'instant $t + \Delta t$ on constate la présence de nouveaux modes dans $G(x, y, t + \Delta t)$.

$$G(x, y, t + \Delta t) \simeq G(x, y, t) - \Delta t([H(x, y, t), G(x, y, t)] + D\Delta G(x, y, t)) \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} G(x, y, t + \Delta t) &\simeq g(t)\sin(qx + ry)(1 - \Delta t D(q^2 + r^2)) \\ &+ \Delta t(or - pq)h(t)g(t)(\cos((q - o)x + (r - p)y) + \cos((q + o)x + (r + p)y))/2 \end{aligned} \quad (2.18)$$

En prenant un maillage de $N_x \times N_y$ avec $N_x = N_y = n$ points et les modes $q = r = o = p = n/3$ alors le mode $q + o = r + p = 2n/3$ n'est plus discernable du mode $-n/3$ par le maillage initial, la fréquence de Nyquist $n_{Nyquist} = n/2$ étant dépassée. Ceci pose évidemment un problème car la version discrétisée du système contient alors des couplages qui ne sont pas présents dans la version continue (avec $n_y \rightarrow \infty$ et $n_x \rightarrow \infty$). Au fil des itérations temporelles, c'est l'ensemble du spectre qui sera touché car chacun des modes, par couplages binaires successifs, sera touché par un mode sensible au repliement du spectre. Soit un mode n_0 soumis à une interaction quadratique à l'instant t . Après n_{iter} itérations temporelles (à l'instant $t + n_{iter}\Delta t$) le mode $2^{n_{iter}} \times n_0$ peut être impacté par une erreur initialement présente sur le mode n_0 . L'utilisation d'un plus grand nombre de degrés de liberté pour discrétiser le système ne permet de repousser le problème qu'un temps très court, tout en étant très coûteux. La règle des "2/3" introduite dans [Orszag 1971] impose une projection telle que les modes ne s'impactent pas eux même après un couplage quadratique : la valeur absolue de chacun des modes présents dans le système ne doit pas dépasser $M_{cut} = 2/3 \times n_{Nyquist} = n/3$. L'utilisation d'un tel filtre ou d'une projection contraint le système à rester dans un domaine où les méthodes numériques sont valides en contrôlant explicitement l'information lorsqu'elle est transférée vers des échelles trop petites. Ce contrôle est une absorption de l'information transportée en dessous de l'échelle retenue pour la discrétisation (échelle sous maille).

2.5.3.2 Hypothèse de continuité liée à l'utilisation du filtre

Pour aller plus loin dans la compréhension du rôle de ce filtre, il est intéressant de voir que la représentation en série de Fourier issue des n points (x_i, f_i) permet en fait d'estimer $f(x)$ sur tout l'intervalle $[x_1, x_n]$, de façon continue grâce aux propriétés des fonctions trigonométriques utilisées. Cependant, cet prolongement impose à la série f_i de posséder les mêmes propriétés que la base trigonométrique utilisée (périodicité, \mathcal{C}^∞) sous peine d'être mal retranscrite. De fortes discontinuités dans les données f_i seront mal représentées après filtrage à cause de la non-localité d'un tel traitement. Il est possible de faire l'hypothèse d'un autre prolongement de f entre les points x_i , par exemple polynomial par morceau grâce à des splines, des ondelettes. Cette nouvelle base ne remet en cause ni le comportement du modèle théorique, ni les conséquences de la finitude de l'outil informatique. Il est alors naturel d'établir de nouvelles contraintes sur l'enrichissement du "spectre" dans "l'espace des ondelettes". Le support compact des ondelettes par rapport au support étendu des fonctions trigonométriques donne un aperçu de la diversité des filtres possibles.

2.5.3.3 Aucun filtre nécessaire pour les méthodes purement lagrangiennes

Il est intéressant de noter qu'une méthode basée sur des interactions à N corps estimant les interactions entre chaque particule sans passer par la détermination d'un champ d'interaction continu ne serait pas sujet au souci d'enrichissement du spectre. En effet, l'équation de Vlasov elle-même ne nécessite pas d'hypothèses pour prolonger la fonction de distribution entre deux particules. C'est la partie Eulérienne des méthodes PIC appliquées au problème de Vlasov-Poisson qui rencontre des soucis de bruit et de continuité pour estimer le potentiel électrique. L'approche Lagrangienne est alors limitée par la partie Eulérienne de la méthode. A l'inverse, comme une quantité finie de degrés de liberté ne peut représenter qu'une quantité finie d'information, une méthode à N corps sera sujette à un appauvrissement local de l'information lorsqu'une partie de l'espace est désertée par les particules simulées.

2.5.4 Formalisme complet de la méthode PoPe

Les notions d'erreurs, de discrétisation et de filtre permettent de synthétiser la formulation de PoPe en distinguant trois espaces emboîtés contenant des solutions au problème théorique et deux projections permettant de plonger d'un espace à l'autre (voir figure 2.6). Soit \mathcal{N} l'ensemble des fonctions permettant de décrire les solutions N de l'équation $\partial_t N = \mathcal{L}(N)$ avec \mathcal{L} un opérateur donné. Typiquement, l'ensemble \mathcal{N} pour le modèle de TOKAM2D est l'espace des fonctions à trois dimensions (deux périodiques pour la position et une pour le temps) d'une régularité \mathcal{C}^∞ . Soit \mathcal{N}_d associé à \mathcal{N} par la projection $P_d(\mathcal{N}) = \mathcal{N}_d$ qui applique une discrétisation aux fonctions contenues dans \mathcal{N} . Cette étape de discrétisation est associée à une hypothèse de prolongement qui permet par exemple, dans le cas des séries de Fourier, d'associer une fonction continue à une série discrète de points. Soit \mathcal{N}_v associé à \mathcal{N}_d par la projection $P_v(\mathcal{N}_d) = \mathcal{N}_v$ qui permet de sélectionner l'ensemble des solutions ne mettant pas en défaut la discrétisation par l'application de l'opérateur \mathcal{L} . Dans le cas de TOKAM2D, cette restriction est le filtre de de-aliasing restreignant la solution à un ensemble de solutions dont un tiers du spectre est d'amplitude nulle pour contrôler l'erreur des termes quadratiques comme le crochet de Poisson. Si des termes cubiques étaient présents dans \mathcal{L} , le filtre nécessaire serait plus restrictif. L'opérateur \mathcal{L} est aussi sujet aux mêmes projections. \mathcal{L}_d est l'opérateur capable de déterminer une dérivée analytique à partir d'un élément de \mathcal{N}_d en connaissant les hypothèses de prolongements. \mathcal{L}_v est l'opérateur qui n'appliquera pas les interactions de \mathcal{L}_d qui mettraient en défaut la discrétisation d'un élément de \mathcal{N}_d . Dans le cas d'un opérateur quadratique tel qu'un crochet de Poisson, les interactions entre modes conduisant à des effets d'aliasing ne sont pas effectuées pour ne pas introduire d'erreur. Cette étape permet de ne pas polluer la solution au cours de l'intégration temporelle : $N_v(t + \Delta t) = N_v(t) + \Delta t \mathcal{L}_v(N_v(t))$. Enfin, le complémentaire de chaque projection est défini tel que $\mathcal{N} = P_d(\mathcal{N}) + P_{-d}(\mathcal{N})$ et $\mathcal{N}_d = P_v(\mathcal{N}_d) + P_{-v}(\mathcal{N}_d)$, ce qui conduit à $P_d(P_{-d}(\mathcal{N})) = P_{-d}(P_d(\mathcal{N})) = 0$, en rappelant $P_d(P_d(\mathcal{N})) = P_d(\mathcal{N})$ (et idem pour P_v).

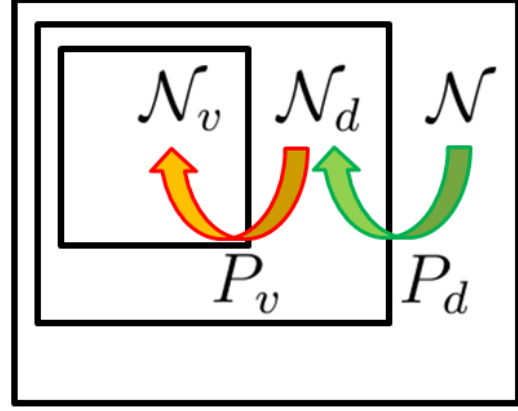
$$P_d(\mathcal{N}) = \mathcal{N}_d \quad P_v(\mathcal{N}_d) = \mathcal{N}_v \quad (2.19)$$

$$P_d(\mathcal{L}) = \mathcal{L}_d \quad P_v(\mathcal{L}_d) = \mathcal{L}_v \quad (2.20)$$

FIGURE 2.6 – Illustration des trois ensembles \mathcal{N} (ensemble des solutions continues), \mathcal{N}_d (ensemble des solutions discrétisées) et \mathcal{N}_v (ensembles des solutions dont la dynamique ne met pas en défaut la discrétisation). Ces trois ensembles sont liés par deux projections P_d et P_v .

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \mathcal{N}_d = \mathcal{N},$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \mathcal{N}_v = \mathcal{N}$$



Quatre niveaux de descriptions basés sur ces définitions sont introduits :

Premier niveau : le modèle analytique que l'on souhaite simuler :

$$\partial_t N = \mathcal{L}(N) = \sum_{i=1}^8 \alpha_{N,i} O_i(N, W, \phi) \quad (2.21)$$

Deuxième niveau : le modèle analytique discrétisé avec $P_d(N) = N_d$:

$$\partial_{t,d} N_d = \mathcal{L}_d(N_d) = \sum_{i=1}^8 \alpha_{N,i} O_{i,d}(N, W, \phi) \quad (2.22)$$

Troisième niveau : le modèle analytique discrétisé contraint à une dynamique valide avec $P_v(N_d) = N_v$ et $N_d = P_v(N_d) + P_{-v}(N_d) = N_v + N_{-v}$. Cette projection est le filtre de de-aliasing de TOKAM2D. Elle est nécessaire pour assurer $\mathcal{L}_v(N_v) \in \mathcal{N}_v$.

$$\partial_{t,v} N_v = \mathcal{L}_v(N_v) = \sum_{i=1}^8 \alpha_{N,i} O_{i,v}(N, W, \phi) \quad (2.23)$$

Quatrième niveau : le modèle numérique effectif qui est implémenté dans le code étudié. Ce niveau de description prend en compte la dérivée temporelle discrétisée $\delta_{t,d} N$ directement mesurée dans les sorties du code étudié. Un terme d'erreurs ε_d est ajouté à la liste des opérateurs permettant la prise en compte de possibles erreurs du code lors de la décomposition de la dérivée temporelle mesurée en sortie de ce dernier : $\delta_{t,d} N_d = \partial_{t,d} N_d + \varepsilon_d$. Le premier cas de figure est l'utilisation d'un code n'utilisant pas P_v dans son moteur de calcul. La dérivée temporelle mesurée est alors décomposée comme suit :

$$\delta_{t,d} N_d = \mathcal{L}_d(N_d) + \varepsilon_d \quad (2.24)$$

$$= \mathcal{L}_v(N_d) + \mathcal{L}_{-v}(N_d) + \varepsilon_v + \varepsilon_{-v} \quad (2.25)$$

$$= \mathcal{L}_v(N_v) + \mathcal{L}_v(N_{-v}) + \mathcal{L}_{-v}(N_v) + \mathcal{L}_{-v}(N_{-v}) + \varepsilon_v + \varepsilon_{-v} \quad (2.26)$$

$$= \mathcal{L}_v(N_v) + \varepsilon_v + \varepsilon_\Phi \quad (2.27)$$

Le terme $\mathcal{L}_v(N_d)$ est la dynamique valide pour la discrétisation et l'équation considérées alors que le terme $\mathcal{L}_{-v}(N_d)$ correspond à des interactions non valides telles que l'aliasing. Le terme d'erreur se décompose aussi en une erreur comprise dans la dynamique valide ε_v et une partie non valide ε_{-v} . Les décompositions $N_d = N_v + N_{-v}$ et $\mathcal{L}_d = \mathcal{L}_v + \mathcal{L}_{-v}$ permettent de mettre en évidence un autre raffinement dans les contributions à la dynamique non valide en pointant les termes $\mathcal{L}_v(N_{-v})$, $\mathcal{L}_{-v}(N_v)$ et $\mathcal{L}_{-v}(N_{-v})$: $P_v(N_{-v}) = 0$ et $P_v(\mathcal{L}_{-v}(N_d)) = 0$ par définition. Cette première décomposition de la dérivée temporelle s'oppose au cas où le code utiliserait directement P_v dans son moteur de calcul :

$$\delta_{t,v}N_v = \mathcal{L}_v(N_v) + \varepsilon_v \quad (2.28)$$

Dans ce second cas de figure, les sorties mesurées sont directement $\delta_{t,v}N_v$ et toutes les contributions non valides sont écartées. C'est la configuration la plus maîtrisée, celle qui ne met pas en défaut la méthode numérique. Un code de simulation est écrit pour veiller à garder $|\varepsilon_v| \ll |\partial_{t,v}N_v|$ avec dans l'idéal $\varepsilon_v = 0$, indépendamment de la valeur ε_{-v} ou $\mathcal{L}_{-v}(N_d)$: nous savons que ces deux informations mettent forcément en défaut la méthode numérique, c'est pourquoi elles devraient être directement filtrées dans le code. Si le code ne le fait pas, l'application de P_v en post-traitement permet de ramener ε_d dans \mathcal{N}_v mais cela n'apporte pas la garantie que N_d n'ait jamais été influencée par $\mathcal{L}_{-v}(N_d)$ car $P_v(\varepsilon_\Phi) \neq 0$, généralement. L'importance de $\varepsilon_\Phi = \mathcal{L}_v(N_{-v}) + \mathcal{L}_{-v}(N_v) + \mathcal{L}_{-v}(N_{-v}) + \varepsilon_{-v}$, qui est essentiellement $\varepsilon_\Phi \simeq \mathcal{L}_{-v}(N_v)$ dans le cas de TOKAM2D, permet de juger la pertinence de la méthode numérique employée et de la discrétisation en mesurant l'importance de la dynamique qui n'est pas prise en compte pour l'évolution temporelle du système. Cette mesure ne permet pas de dire qu'un outil est dépourvu de bogues. Comme on le verra plus tard, même si une simulation est sous résolue, que ε_Φ est grand, on peut parfaitement vérifier que le code ne contient pas d'erreur car cet exercice est restreint à la partie valide de la dynamique.

Le quatrième niveau met en évidence la nécessité d'utiliser un filtre à la fois pendant la simulation, pour éviter tout artefact, mais aussi lors des post-traitements pour restreindre tout étude à une dynamique parfaitement valide. La phase de post-traitement doit faire appel à \mathcal{L}_v ou plus simplement à P_{-v} car $P_{-v}(\mathcal{L}_d(N_v)) \neq 0$ généralement. Laisser le code "se filtrer lui-même", sans explicitement appliquer un opérateur P_v , rend difficile la compréhension de la dynamique à l'échelle du maillage et complique l'étude de l'erreur ε_v à cause de la présence de ε_Φ . Les filtres discutés jusqu'à présent agissent uniquement dans l'espace. Cependant, comme évoqué dans l'introduction du chapitre, le système étant aussi discrétisé en temps, une dynamique valide et non valide est définissable dans le temps également. Les méthodes possédant une condition de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) [Courant 1928] ont une contrainte relativement forte qui aura tendance à garder une majeure partie de la dynamique. A l'inverse, les méthodes semi-lagrangiennes qui ne possèdent pas de condition CFL peuvent être utilisées dans des régimes où un pas de temps d'intégration trop large ne permet pas au système de prendre en compte certaines interactions.

2.5.5 Mise en évidence d'une équation dans une simulation

Les équations (2.16) peuvent se réécrire comme un problème d'optimisation à l'aide d'une simple forme matricielle. Soit la matrice A telle que l'élément $A_{i,j}$ soit l'évaluation de l'opérateur i au point numéroté j . Le vecteur colonne A_i est donc l'évaluation de l'opérateur $P_v(O_i(N, W, \phi))$ sur un ensemble de $N_x \times N_y \times N_t$ points dans l'espace (x, y, t) . Dans le cas de TOKAM2D, pour cet exemple, nous prendrons une matrice de 8 colonnes et $N_x \times N_y \times N_t$ lignes. Soit b_N et b_W , les vecteurs colonnes associés de la même façon à $\delta_{t,v}N_v$ et $\delta_{t,v}W_v$. Nous pouvons réécrire (2.16) sous forme matricielle :

$$b_N = A\tilde{\alpha}_N + \tilde{\varepsilon}_{v,N} \quad ; \quad b_W = A\tilde{\alpha}_W + \tilde{\varepsilon}_{v,W} \quad (2.29)$$

$$A^T b_N = (A^T A)\tilde{\alpha}_N + A^T \tilde{\varepsilon}_{v,N} \quad ; \quad A^T b_W = (A^T A)\tilde{\alpha}_W + A^T \tilde{\varepsilon}_{v,W} \quad (2.30)$$

Les poids $\tilde{\alpha}$ sont simplement les inconnues des systèmes linéaires de (2.29). Dans le cas idéal ou $\tilde{\varepsilon}_v = 0$, il suffit d'utiliser 8 points pour avoir autant d'équations que d'inconnues et déterminer $\tilde{\alpha}$ de façon unique. Cependant, il est préférable d'utiliser un nombre de points $N_x \times N_y \times N_t$ supérieur au nombre d'opérateurs en optant pour une méthode des moindres carrés (2.30) afin de limiter l'impact de $\tilde{\varepsilon}_v$ sur la détermination des $\tilde{\alpha}$. Pour tout système matriciel à inverser (ou toute projection), il faut vérifier que la matrice n'est pas singulière. Un système tel que celui de TOKAM2D, avec 2 inconnues (ϕ est directement déterminé par W) discrétisées sur $N_x \times N_y$ points possède $N_x \times N_y$ degrés de libertés pour chaque équation. L'évolution de chaque équation peut donc être décomposée sur $N_x \times N_y$ vecteurs orthogonaux qui prennent la forme de Diracs (un 1 et $N_x \times N_y - 1$ fois 0). Une telle décomposition n'a que peu de sens physique pour étudier un système continu comme TOKAM2D. A l'inverse, la projection sur une liste de 8 opérateurs judicieusement choisis, permet d'expliquer, à $\tilde{\varepsilon}_v$ près, la structure des dérivées temporelles issue d'une simulation.

D'un point de vue analytique, il existe des valeurs de (N, W, ϕ) telles que $O_i(N, W, \phi) \propto \sum_{j \neq i} \omega_j O_j(N, W, \phi)$, $\omega_j \in \mathcal{R}$, avec le cas particulier $O_i(N, W, \phi) = 0$. Ces situations ont pour conséquence de rendre la matrice A singulière. La première situation signifie que des opérateurs différents, modélisant différents effets physiques, ont une empreinte similaire sur la dérivée temporelle. Dans les faits, plus le nombre de points utilisés pour estimer des opérateurs analytiquement distincts augmente, plus la probabilité de rencontrer un couple rendant la matrice A (ou $A^T A$) singulière diminue. Visualiser la contribution des opérateurs dans l'espace réel donne un sens à cette proposition (voir Fig. 2.7 et annexe A pour plus d'illustrations).

- Un crochet de Poisson enrichit le spectre en multipliant deux grandeurs indépendantes. Les motifs qu'il imprime dans la dérivée temporelle représentent les fronts des structures qui se déplacent (Fig. 2.7c). Ces fronts sont majoritairement du même signe et orientés perpendiculairement à la direction de propagation (x).
- Un laplacien change l'amplitude de tous les modes non nuls, sauf le mode zéros, sans élargir le spectre (s'il est calculé dans l'espace de Fourier). Sur la figure 2.7e, on constate que les structures dominantes sont des paires de fronts, un positif et un négatif. Ainsi, alors que ces fronts sont localisés aux mêmes endroits que pour

le crochet de Poisson (Fig. 2.7c), on constate un doublement de période qui rend impossible toute confusion entre un crochet de Poisson et un laplacien.

- Les opérateurs non linéaires que sont l'instabilité ou les puits enrichissent aussi le spectre. Sur les figures Fig. 2.7d et Fig. 2.7f on constate que les motifs de ces opérateurs sont encore différents. L'instabilité possède autant de fronts positifs que négatifs. Ces fronts sont orientés parallèlement à la direction x , direction de propagation des structures. Dans le cas des puits, les structures ne sont plus des fronts mais des formes étendues en deux dimensions.

En régime turbulent, il ne m'est jamais arrivé de rencontrer une matrice singulière en utilisant les bons outils pour estimer les opérateurs (une méthode précise pour les dérivées et l'utilisation du filtre) et en utilisant un nombre suffisant de points suffisamment bien répartis (pour bien capter l'impact de chaque opérateur). "Jamais" signifie ici que sur plus de 10^8 systèmes résolus en utilisant différentes listes d'opérateurs (incluant au moins la liste d'opérateur du code testé), sur des simulations réalisées avec différents maillages et contenant différentes dynamiques, aucun problème de singularité n'est apparu. Ceci n'a pas valeur de démonstration. Il est certain que les opérateurs ne sont pas orthogonaux mais ils ont, d'après mon expérience, une partie non-colinéaire suffisamment importante pour rendre le système eq.(2.29) inversible. Dans tous les cas, une simple orthogonalisation de la matrice A mettra en évidence la colonne qui n'apporte pas d'information ou une information redondante et permettra de la retirer du système linéaire ainsi que de retirer l'opérateur du modèle testé. Un autre avantage de cette formulation matricielle linéaire est que la recherche des poids peut être vue comme un problème d'optimisation. Dans le cas où autant d'inconnues que d'équations sont utilisées, il faut résoudre une égalité. Dans le cas de la formulation en moindre carrés, c'est un problème de minimisation de $\tilde{\varepsilon}_v$. Cette approche permet d'intégrer des contraintes d'inégalités à la méthode PoPe en adoptant une approche d'optimisation sous contrainte.

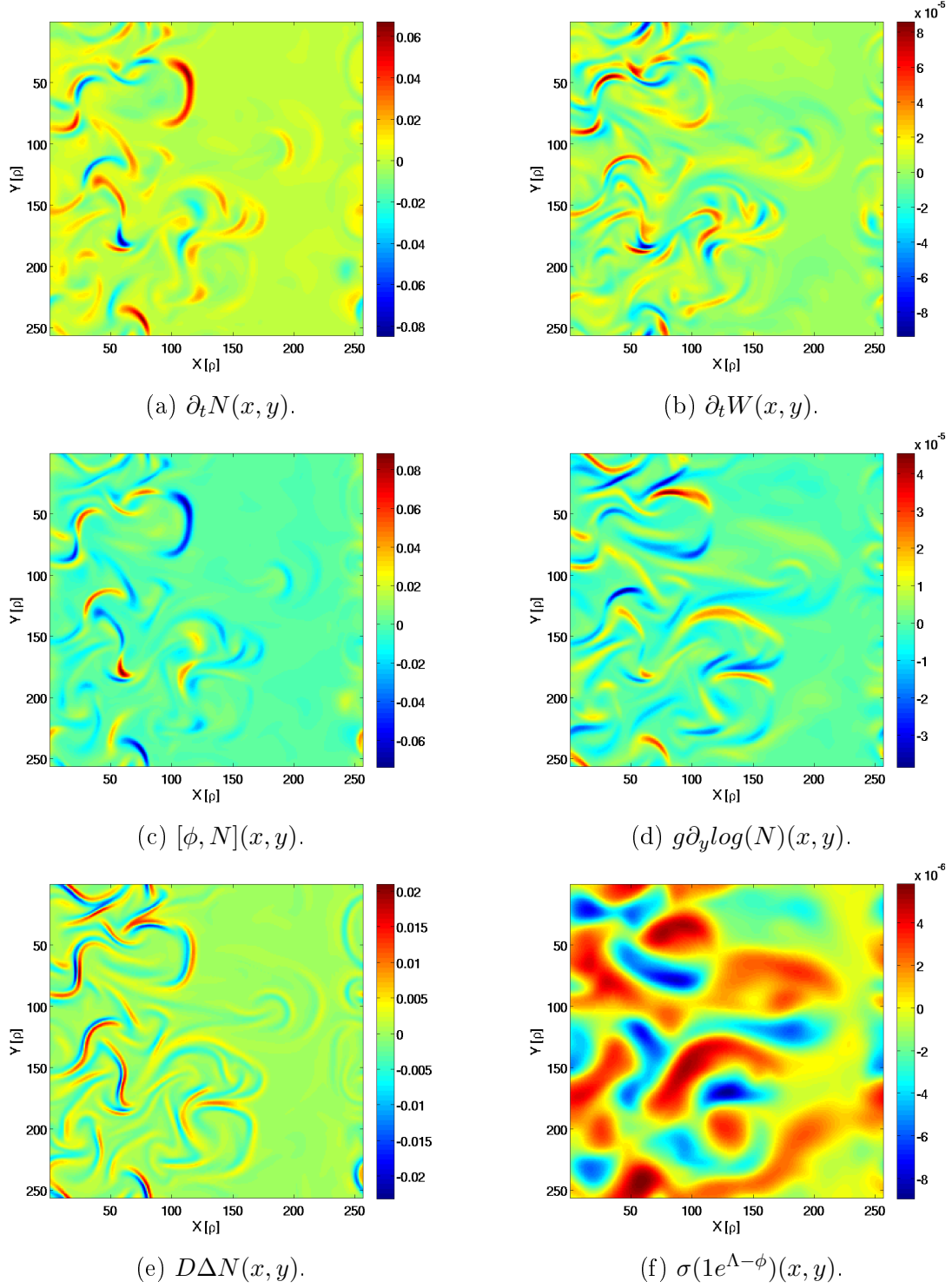


FIGURE 2.7 – Illustrations dans l’espace réel de différents opérateurs d’une simulation typique du code TOKAM2D. Voir l’annexe A pour les autres termes. Simulation standard (type S1, voir tab. 2.1).

2.6 Procédure pour la mise en place de PoPe

La mise en place de PoPe pour un code quelconque se résume à 2 étapes : 1/ l'instrumentation du code (ou de son environnement dans le cas d'une boîte noire) pour obtenir les mesures nécessaires à la deuxième étape qui peut être qualifiée de data mining, 2/ le développement des post-traitements qui sont essentiellement des outils de régression.

2.6.1 Modification de code sources, manipulation de boîtes noires

Dans le cas où les sources du code à tester sont modifiables, la mesure des membres de droite des équations eq.(2.29) (c'est-à-dire les membres de droites des équations eq.(2.12, 2.13)) est extrêmement facile. Dans le cas d'une équation d'évolution, il faut simplement mesurer la dérivée temporelle de l'inconnue étudiée. Dans le cas d'une équation d'équilibre, ce sont les contraintes imposées qu'il faut mesurer. Estimer la dérivée temporelle d'une variable se fait efficacement par différence finie. L'ordre des différences est choisi supérieur ou égal à l'ordre de l'intégrateur temporel du code considéré. Le temps de calcul nécessaire à cette opération est extrêmement faible car il ne s'agit que d'additions. La mémoire vive nécessaire est réduite à une fois la taille de l'inconnue considérée. Soit Δt_{diag} , le pas de temps de sauvegarde du diagnostic et $t_0^i = i \times \Delta t_{diag}$ le temps correspondant à la sauvegarde numéro i . Soit Δt_{DF} le pas de temps considéré pour calculer la dérivée temporelle. Alors l'essentiel de la difficulté de cette tâche est de détecter les instants $t^i - 2\Delta t_{DF}$, $t^i - \Delta t_{DF}$, t^i , $t^i + \Delta t_{DF}$ et $t^i + 2\Delta t_{DF}$ qui contribuent au calcul des différences finies basées sur 5 points à l'instant t^i . Dans le cas d'un pas de temps d'intégration variable au cours du temps (comme pour TERESA), des ajustements sont nécessaires pour évaluer le système aux temps utilisés pour le calcul de la dérivée temporelle. Un code source simple et efficace évitant une surcharge de mémoire vive est présenté annexe B.

Dans le cas où le code utilisé est une boîte noire qui offre cependant la possibilité de redémarrer une simulation, alors il suffit de chaîner des simulations d'une durée Δt_{diag} , entrecoupées de simulations d'une durée de $5 \times \Delta t_{DF}$ avec des sauvegardes tous les Δt_{DF} . L'espace disque nécessaire pour estimer les dérivées temporelles est alors supérieur au cas où le code source n'est pas une boîte noire mais il reste inférieur à une méthode qui consisterait à sauvegarder les inconnues principales tous les $\Delta t_{diag} = \Delta t_{DF}$ pendant toute la simulation.

2.6.2 Développement des post-traitements de PoPe

Le script de post-traitements doit remplir 4 tâches élémentaires et indépendantes :

- Le calcul des différents opérateurs O_i à partir des données issues du code. Dans le cas de TOKAM, le prototype de cette fonction se résume à prendre en entrée la densité, le potentiel électrique (dont on déduit la vorticité), les dimensions de la boîte de simulation, le paramètre Λ nécessaire au calcul des puits, le paramètre L_s pour estimer la source ainsi que des indications sur la façon d'estimer les dérivées spatiales. L'estimation des 8 opérateurs pour TOKAM tient en moins de 50 lignes.

Cela tombe à 10 lignes pour les 4 opérateurs TERESA (en faisant appel dans les deux cas à une fonction de 50 lignes estimant les dérivées spatiales n -ièmes à différents ordres, avec différentes méthodes). Pour s'assurer de la bonne implémentation de cette étape et approfondir la compréhension du modèle considéré, il est intéressant de visualiser chacun des termes de l'équation à cette étape (comme vu sur les figures 2.7). L'utilisation de plusieurs méthodes indépendantes pour estimer chacun des O_i à cette étape de la procédure permet de déterminer, dans des conditions réalistes, la méthode qui atteindra le meilleur compromis temps de calcul - erreur.

- L'application de l'opérateur servant de filtre P_v (e.g. anti-aliasing). Cet opérateur servira à filtrer les sorties de la routine précédente pour gérer de façon précise la contribution de ε_Φ . Dans le cas où le code à vérifier ne possède pas d'opérateur P_v explicite, un opérateur peut être choisi de façon indépendante pour être appliqué à toutes les sorties du codes, en plus des opérateurs O_i . Néanmoins, il ne sera pas possible de complètement découpler les interactions entre dynamique valide et non valide. Selon le choix du filtre, cette procédure peut être coûteuse en temps de calcul et nécessiter un code long. Dans le cas d'un filtre en Fourier 10 lignes suffisent, dans le cas des ondelettes utilisées dans TERESA, 200 lignes sont nécessaires.
- L'assemblage de la matrice A (voir eq.(2.29)). Cette étape nécessite simplement de choisir l'ensemble de $n = N_x \times N_y \times N_t$ points sur lesquels les opérateurs ont été évalués. Dans le cas où le nombre de points utilisés est supérieur au nombre d'opérateurs, la matrice A et le membre de droite permettent de réaliser une première analyse statistique avec une procédure standard de moindres carrés.
- Enfin, la résolution du système linéaire. Étant donné la taille modeste du problème, des méthodes basiques suffisent. Une étape d'étude du conditionnement de A peut être utile pour automatiser la détection d'une colinéarité. En Python, cette étude tient en 1 ligne, la réorganisation de la matrice en moins de 10 lignes.

En résumé, les ajouts apportés au code TOKAM et TERESA portent sur moins de 50 lignes. Le module de post-traitement PoPe de TOKAM (en Matlab) comme celui de TERESA (en Python) comptent moins de 300 lignes. Ceci est à comparer aux 2000 lignes en Fortran de TOKAM et aux 20000 lignes en Fortran/MPI/OpenMP de TERESA. Cet écart illustre le fait que les opérateurs estimés dans PoPe ne nécessitent pas de splitting spatial ou temporel, aucun pied de caractéristique ne doit être déterminé, aucune interpolation n'est nécessaire. Tous ces mécanismes qui constituent le cœur d'un code de simulation, son moteur de calcul, sont là pour gérer la tâche de l'intégration temporelle avec la meilleure précision et le plus faible coût possible. PoPe ne détermine que la contribution instantanée de chaque opérateur. Cette seconde tâche s'écrit de façon simple pour un coût en calcul réduit. Le faible nombre de lignes nécessaires à PoPe et la simplicité des différentes étapes diminue d'autant la probabilité de commettre une erreur dans les scripts servant à la vérification.

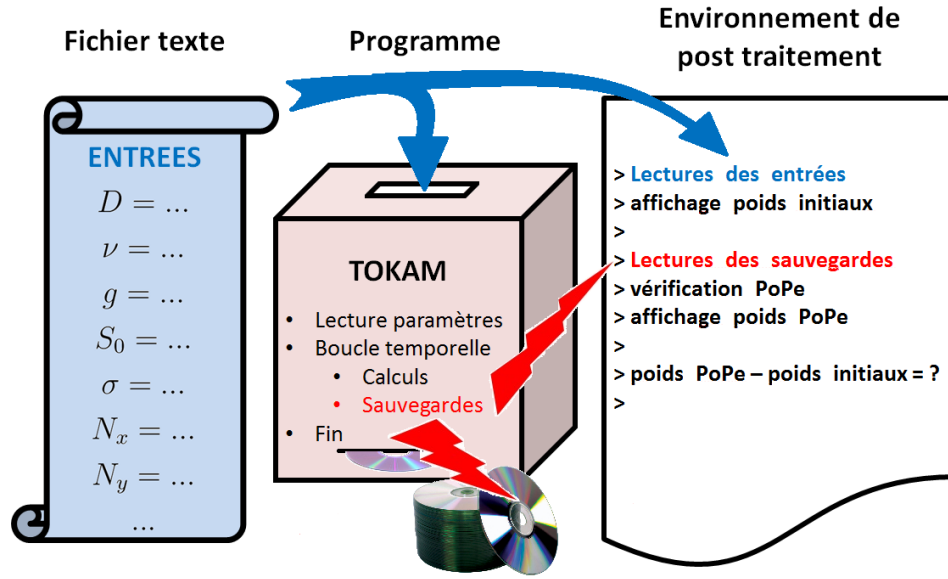


FIGURE 2.8 – Illustration de l'utilisation de PoPe. Un court fichier d'entrée est soumis à un programme qui génère des données. Les sorties du code sont analysées par PoPe dans un environnement de post-traitement puis comparées aux entrées injectées dans le code.

2.7 Compréhension et traitement des résultats de PoPe

Les résultats issus de PoPe sont présentés pour le code TOKAM2D en utilisant les deux jeux de paramètres du tableau 2.1 pour les simulations considérées. Le jeu S1 correspond à une simulation standard, dans le sens où la dynamique simulée est riche. Le jeu S2 a été choisi pour étudier les impacts de la résolution numérique. Le domaine de simulation du jeu S2 étant 4 fois plus petit que celui de S1, et les coefficients de diffusions D et ν étant 2 fois plus grands, la dynamique d'une simulation de type S2 est moins riche, avec une dynamique plus lente que la dynamique d'une simulation type S1. Le choix d'un pas d'intégration Δt 8 fois plus faible assure aussi une minimisation de l'erreur. Néanmoins, les conclusions obtenues à partir des jeux S1 et S2 sont qualitativement les mêmes.

	D	ν	σ	g	S_0	$L_x [\rho]$	$L_y [\rho]$	N_x	N_y	$\Delta t [\omega_0]$
S1	0.01	0.01	$\simeq 1.14 \times 10^{-5}$	$\simeq 5.72 \times 10^{-4}$	0.01	256	256	256	256	1
S2	0.02	0.02	$\simeq 1.14 \times 10^{-5}$	$\simeq 5.72 \times 10^{-4}$	0.01	128	128	256	256	0.125

TABLE 2.1 – Deux ensembles de paramètres utilisés pour les simulations TOKAM2D (voir eq.(2.1,2.2,2.3)). S1 est une simulation standard. S2 est une simulation sur résolue. Les paramètres $\Lambda \simeq 3.88$ et $L_s = 8.5$ sont communs aux deux simulations.

Les équations eq.(2.29) sont résolues par PoPe sur un ensemble de $n = N_x \times N_y \times N_t$ points. En théorie, le choix des points est relativement souple car l'équation que l'on cherche est valable partout dans l'espace (x, y) et au cours du temps t . Il est ainsi

possible d'utiliser l'ensemble des points d'une simulation pour estimer un seul couple $(\tilde{\alpha}, \tilde{\varepsilon})$. Cependant, pour mettre plus facilement en évidence les défauts d'un code, il est intéressant de partitionner l'ensemble des n points, par exemple, en N_t ensembles de $N_x \times N_y$ points. Cette seconde partition permettra d'obtenir N_t estimations de $(\tilde{\alpha}, \tilde{\varepsilon})$. Cette séquence temporelle permettra de projeter l'erreur $\tilde{\varepsilon}$ dans le plan (x, y) pour étudier les propriétés du résidu au cours du temps. Il est alors possible de mettre en évidence des problèmes numériques dans les différents régimes du code (linéaire ou non linéaire) ou dans certaines zones du maillage.

2.7.1 Étude du poids des équations, $\tilde{\alpha}$

Les poids des équations permettent de mesurer l'empreinte d'un opérateur O_i dans la dérivée temporelle d'une équation. L'écart entre α_i , la valeur théorique, et $\tilde{\alpha}_i = \alpha_i + \delta\alpha_i$, la valeur mesurée par PoPe, permet de détecter une éventuelle surestimation ou sous-estimation d'un opérateur. Sur la Fig. 2.9, quatre traces temporelles du logarithme décimal de $|\delta\alpha_i| = |\tilde{\alpha}_i - \alpha_i|$ sont représentées (en échelle logarithmique). Le poids du crochet $[\phi, N]$ est en rouge et le poids du crochet $[\phi, W]$ est en bleu. Tous les deux sont mesurés dans l'équation sur la densité eq.(2.12), à partir de $\delta_{t,v}N_v$, donc avec des poids théoriques tels que $-\mathbf{1}_{[\phi, N]} = -1$ et $-\mathbf{1}_{[\phi, W]} = 0$. Toutes les courbes sont issues d'une unique simulation TOKAM2D de type S2. Les courbes en trait continu n'utilisent pas P_v (la projection qui restreint un champ à la dynamique valide pour la discrétisation considérée) lors de l'estimation des opérateurs O_i dans PoPe, contrairement aux courbes discontinues. Le but est ici de comparer une simulation mal résolue (trait plein) avec une simulation bien résolue (trait discontinu) en prenant en compte ε_Φ comme une erreur numérique due à un souci du code et non comme une erreur inévitable. Il ne m'a pas été nécessaire de dégrader le code TOKAM2D pour cette étude car ces courbes sont caractéristiques des points que je souhaite illustrer. Les courbes représentant le poids $-\mathbf{1}_{[\phi, N]}$ (rouge) montrent une erreur moins importante d'environ 3 ordres de grandeurs que les courbes représentant $-\mathbf{1}_{[\phi, W]}$ (bleues). L'utilisation du filtre P_v permet aussi de diminuer l'erreur de 3 ordres de grandeurs. L'affichage en logarithme met en avant les changements de signes de chacune de ces courbes : on remarque que l'opérateur $-\mathbf{1}_{[\phi, W]}$ (courbes bleues) qui n'est pas présent dans l'équation étudiée change régulièrement de signe (structures en forme de pics). Une première étude des NDF (histogramme) représentées sur la Fig. 2.10 se résume au tableau tab. 2.2. Leurs lectures sont facilitées par l'introduction de l'indice de confiance $C = |\mathbb{E}(\tilde{\alpha}(t))|/\sigma(\tilde{\alpha}(t))$ avec \mathbb{E} l'espérance et σ l'écart type de la série temporelle $\tilde{\alpha}(t)$. Dans le cas idéal d'une densité de probabilité en forme de Dirac, $C \rightarrow \infty$. Dans le cas où un opérateur ne serait pas présent dans le code, $C \rightarrow 0$. Un opérateur dont la dynamique serait mal capturée par la méthode PoPe aura un indice de confiance oscillant autour de 1.

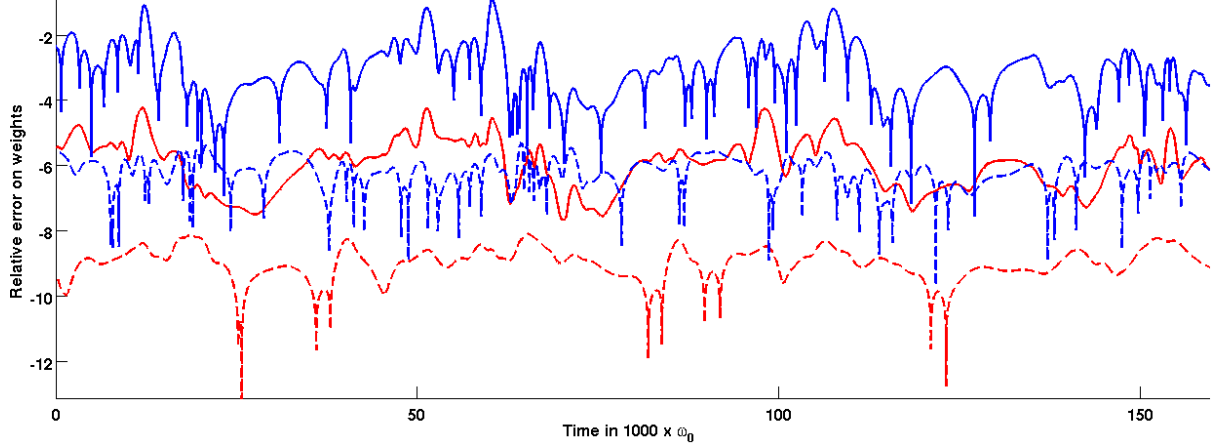


FIGURE 2.9 – Trace temporelle de $\log_{10}(|\alpha_i - \tilde{\alpha}_i|)$ pour $-1_{[\phi, N]} = -1$ (en rouge) et $-1_{[\phi, w]} = 0$ (en bleu) dans l'équation sur la densité de TOKAM2D. Les traits continus sont entachés de l'erreur $\varepsilon_{\phi, N}$ alors que les traits discontinus sont obtenues en utilisant P_v pour estimer les opérateurs O_i dans PoPe.

	$-1_{[\phi, N]}$	$-1_{[\phi, w]}$	$P_v : (-1_{[\phi, N]})$	$P_v : (-1_{[\phi, w]})$	$P_v : (-g)$
α_i	-1.00	0.00	-1.00	0.00	-11.4×10^{-6}
$\mathbb{E}(\tilde{\alpha}(t))$	-1.00	0.565×10^{-3}	-1.00	-0.170×10^{-6}	-11.4×10^{-6}
$\mathbb{E}(\delta\alpha(t))$	3.82×10^{-6}	0.565×10^{-3}	1.57×10^{-9}	-0.170×10^{-6}	14.3×10^{-15}
$\sigma(\tilde{\alpha}(t))$	7.66×10^{-6}	11.4×10^{-3}	1.53×10^{-9}	1.29×10^{-6}	22.0×10^{-15}
$\mathbb{S}(\tilde{\alpha}(t))$	4.31	3.98	1.61	0.822	2.64
$\mathbb{K}(\tilde{\alpha}(t))$	24.8	41.1	5.32	7.98	11.7
$\mathbb{C}(\tilde{\alpha}(t))$	0.131×10^6	49.7×10^{-3}	0.652×10^9	132×10^{-3}	0.515×10^9

TABLE 2.2 – Espérance \mathbb{E} , écart type σ , Skewness \mathbb{S} , Kurtosis \mathbb{K} , indice de confiance \mathbb{C} des NDF Fig. 2.10 sur 3 chiffres significatifs. Le poids $P_v : -g$ (qui pondère l'instabilité $\partial_y \log(N)$) est ajouté pour appuyer l'intérêt de l'indice \mathbb{C} . Les paramètres de la simulation sont du type S2 (tab. 2.1).

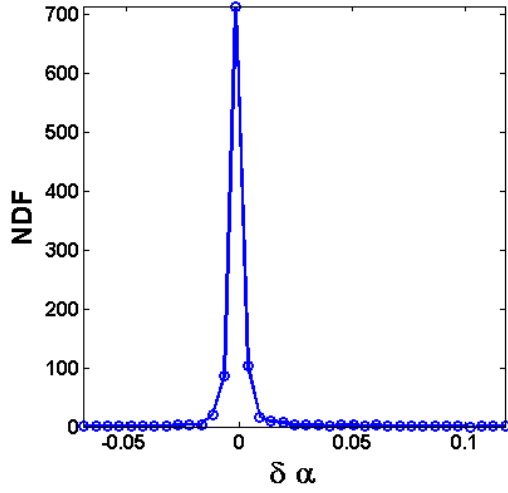
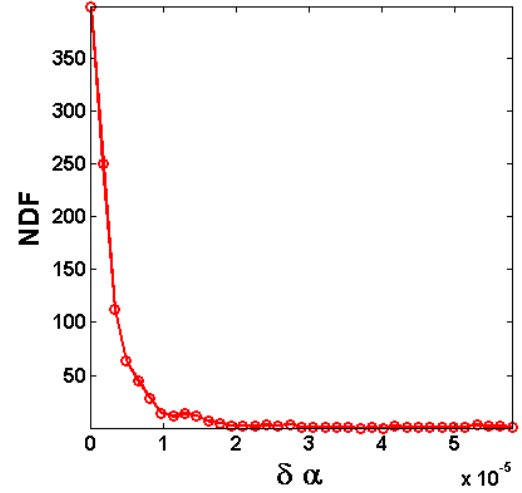
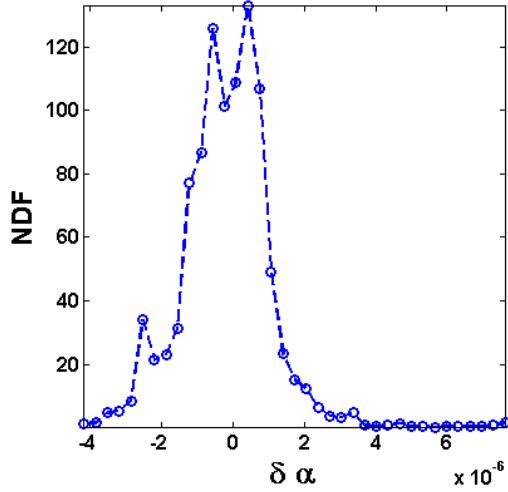
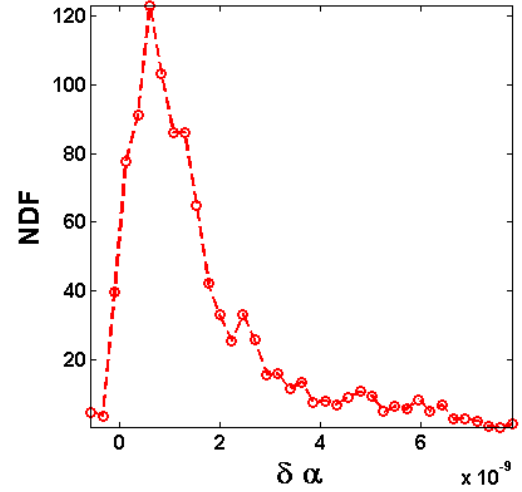
(a) NDF bleue continue $-\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{w}]} = 0$ (b) NDF rouge continue $-\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{N}]} = -1$ (c) NDF bleue discontinue $P_v : -\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{w}]} = 0$ (d) NDF rouge discontinue $P_v : -\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{N}]} = -1$

FIGURE 2.10 – Zooms successifs sur 4 NDF de $\delta \alpha_{N,i}$. Courbes rouges : $-\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{N}]} = -1$, Courbes bleues : $-\mathbf{1}_{[\phi, \mathbf{w}]} = 0$. Courbes continues : sans utilisation de P_v , courbes discontinues : utilisation de P_v . Ces courbes sont issues d'une unique simulation typique du code TOKAM2D. L'utilisation du filtre P_v diminue l'écart-type des NDF ce qui augmente d'autant leur indice de confiance C .

Le tableau tab. 2.2 reprend les indicateurs classiques servant à étudier une NDF :

α_i : les poids des opérateurs $[\phi, N]$ et $\partial_y \log(N)$ sont non nuls et différents de 5 ordres de grandeurs. Le poids associé à l'opérateur $[\phi, W]$ est nul car il n'est pas présent dans l'équation étudiée (eq.(2.12)).

$E(\tilde{\alpha}_i(t))$, $E(\delta\alpha_i(t))$: l'erreur des poids dont l'espérance est différente de zéro est inférieure de 6 ordres de grandeurs par rapport à l'espérance de ces derniers, lorsque le filtre P_v n'est pas utilisé. Avec le filtre, l'erreur relative passe à 9 ordres de grandeurs. Une erreur relative ne peut pas être définie pour les opérateurs ayant un poids nul. L'erreur absolue est de 10^{-3} sans P_v et passe à 10^{-6} avec.

$\sigma(\tilde{\alpha}_i(t))$: la variance suit le même comportement que l'espérance vis à vis du filtre P_v ainsi que l'appartenance ou non d'un opérateur à l'équation. Il est intéressant de voir que dans les 5 cas présentés, $E(\delta\alpha_i(t))$ (l'erreur de surestimation ou sous-estimation) et $\sigma(\tilde{\alpha}_i(t))$ sont du même ordre.

$C(\tilde{\alpha}_i(t))$: l'indice de confiance semble pertinent pour juger de la présence ou l'absence d'un opérateur dans le modèle testé. En effet, sa valeur est significativement élevée pour $[\phi, N]$, $P_v([\phi, N])$ et $P_v(\partial_y \log(N))$, les trois opérateurs présents, avec deux valeurs très proches pour les opérateurs filtrés, malgré les 5 ordres de grandeurs qui séparent leur poids respectifs. L'utilisation du filtre augmente de 3 ordres de grandeurs l'indice pour les opérateurs présents tout n'augmentant que d'un modeste facteur $\times 2,5$ l'opérateur absent. Il y a plus de 9 ordres de grandeurs entre le poids d'un opérateur présent dans l'équation testée et un opérateur absent, indépendamment du poids des opérateurs considérés.

L'analyse des formes des 4 NDF apporte une information sur la répartition des valeurs prises par les poids. Comme la Fig. 2.10 le montrait déjà, on peut voir que les NDF des opérateurs qui ne sont pas présents dans l'équation sont relativement symétriques, à l'inverse des opérateurs présents dans l'équation pour lesquels les NDF sont non centrées avec une forte déviation vers 0. Ainsi, le poids de l'opérateur considéré est essentiellement sous-estimé. La forme de ces NDF rappelle les lois de Poisson exponentielle. Elles correspondent à des cas avec une probabilité faible de ne pas retrouver le poids théorique : il existe des situations rares où l'équation est imparfaitement résolue. Lorsque c'est le cas, l'erreur se fait presque toujours de la même façon. Le dernier cas de figure concernant la liste d'opérateurs testés est le cas où un opérateur présent dans le code ne serait pas présent dans la liste des opérateurs. Si l'opérateur manquant O_i possède une composante colinéaire à un opérateur existant O_j , la partie colinéaire à ce second opérateur sera projetée sur le poids $\tilde{\alpha}_j$. Comme la colinéarité peut changer au cours du temps, le poids $\tilde{\alpha}_j$ sera composé de la valeur qu'il aurait eue dans le cas où O_i ne serait pas manquant, plus la perturbation issue de la projection de O_i sur O_j . Dans ce cas de figure, le résidu ε_v contiendra l'opérateur manquant alors que $\tilde{\varepsilon}_v$ contiendra la partie orthogonale de l'opérateur manquant par rapport à l'ensemble des opérateurs présents. Bien que les poids $\tilde{\alpha}_i$ soient très informatifs, c'est bien ε_v qui contient la totalité de l'information sur l'écart entre la dérivée temporelle du code et la liste des opérateurs testés, ainsi il est nécessaire d'étudier ε_v pour trancher toute incertitude.

2.7.2 Étude du résidu des équations, ε

Vérifier un code de simulation revient à vérifier l'inégalité $|\partial_{t,v}N_v - \delta_{t,v}N_v| = |\varepsilon_{N,v}| \ll |\partial_{t,v}N_v|$. On compare donc l'importance de l'erreur du code dans le domaine valide par rapport à l'importance de la dynamique du modèle dans ce même domaine.

Vérifier l'impact d'une méthode numérique et la discrétisation associée revient ainsi à étudier $|\partial_{t,-v}N_v| \simeq |\varepsilon_{N,\Phi}| \ll |\partial_{t,v}N_v|$. On compare ici l'information qu'une méthode numérique ne peut pas représenter par rapport à l'information qui est représentée.

De façon similaire, lors de réductions ou qualifications de modèles, les opérateurs mis en œuvre ne reproduisent qu'une partie de la dynamique donc $\varepsilon \neq 0$. L'analyse de ce résidu est un complément indispensable pour déterminer les opérateurs qui génèrent une information spécifique et présentant un intérêt physique pour établir un critère sur la qualité globale du modèle. Sur la figure 2.11 sont représentés $\varepsilon_{N,v}$, $\tilde{\varepsilon}_{N,v}$ et $\varepsilon_{N,\Phi}$ dans l'espace réel (colonne de gauche) et dans l'espace de Fourier (colonne de droite). Ces images sont prises dans les mêmes conditions que la série Fig. 2.7. Si l'on considère les amplitudes $\Delta_{\delta_{t,v}N_v} \simeq [-10^{-2}, 10^{-2}]$, $\Delta_{\varepsilon_{N,v}} \simeq [-10^{-6}, 10^{-6}]$, $\Delta_{\tilde{\varepsilon}_{N,v}} \simeq [-10^{-7}, 10^{-7}]$ et $\Delta_{\varepsilon_{N,\Phi}} \simeq [-10^{-4}, 10^{-4}]$, on constate que l'erreur $\varepsilon_{N,v}$ est 2 ordres de grandeur inférieure à la dynamique non valide qui est elle-même 2 ordres inférieure à la dynamique valide. Passer de $\varepsilon_{N,v}$ à $\tilde{\varepsilon}_{N,v}$ diminue d'un ordre de grandeur le résidu. La nature de la dynamique non valide prend tout son sens à la vue des rapides oscillations présentes Fig. 2.11e. L'erreur n'est pas clairement localisée, elle prend la forme d'une oscillation à très grand vecteur d'onde. C'est un résultat en accord avec la nature du filtre P_v qui sépare la dynamique valide et non valide en forçant à zéro le tiers de modes ayant les plus grands vecteurs d'onde. Les motifs présents dans Fig. 2.11a et Fig. 2.11c n'ont qu'un accord qualitatif, les structures sont similaires mais pas les amplitudes. Cet écart est visible sur les modes de faible vecteur d'onde dans les spectres Fig. 2.11b et Fig. 2.11d.

La caractérisation de l'erreur peut aussi se faire en visualisant des grandeurs comme $\varepsilon_{N,v} = H(\partial_{t,v}N_v)$, où H est une relation que l'on cherchera à mettre en évidence pour exprimer une éventuelle structure de l'erreur. Sur les figures Fig. 2.12 sont illustrées des NDF à 2 dimensions des couples $(\varepsilon_{N,v}, \partial_{t,v}N_v)$ Fig. 2.12a, $(\varepsilon_{N,v}, \partial_{t,v}N_v)$ Fig. 2.12b, $(\varepsilon_{N,\Phi}, \partial_{t,v}N_v)$ Fig. 2.12c et $(\varepsilon_{N,v}, P_v([\phi, N]))$ Fig. 2.12d. Ces figures ont été établies à partir d'un système de $N = N_x \times N_y \times N_t = 256 \times 256 \times 5000 \simeq 3 \times 10^8$ points issus d'une simulation typique S1 (tab. 2.1). L'utilisation d'un unique système implique la détermination d'un seul α et non une série temporelle. Sur la figure 2.12c on constate qu'il n'y a pas de corrélation claire entre l'importance de la dynamique valide et la dynamique non valide, de la même manière que l'on a déjà constaté une non localité de $\varepsilon_{N,\Phi}$ sur les figures Fig. 2.11e et Fig. 2.11f. Un motif plus clair se dégage de la figure 2.12a. Il correspond à ce que l'on attendrait de l'erreur : plus la dynamique est forte, plus l'erreur est forte. De plus, l'erreur prend la forme d'une sous-estimation de la dynamique (signes opposés de $\partial_{t,v}N_v$ et $\varepsilon_{N,v}$). L'étude de la figure 2.12b établit aussi une sous-estimation mais celle-ci est mieux définie car plus systématique et quasiment linéaire (à la largeur de la NDF près) d'une pente $p \simeq -3.5 \times 10^{-6}$.

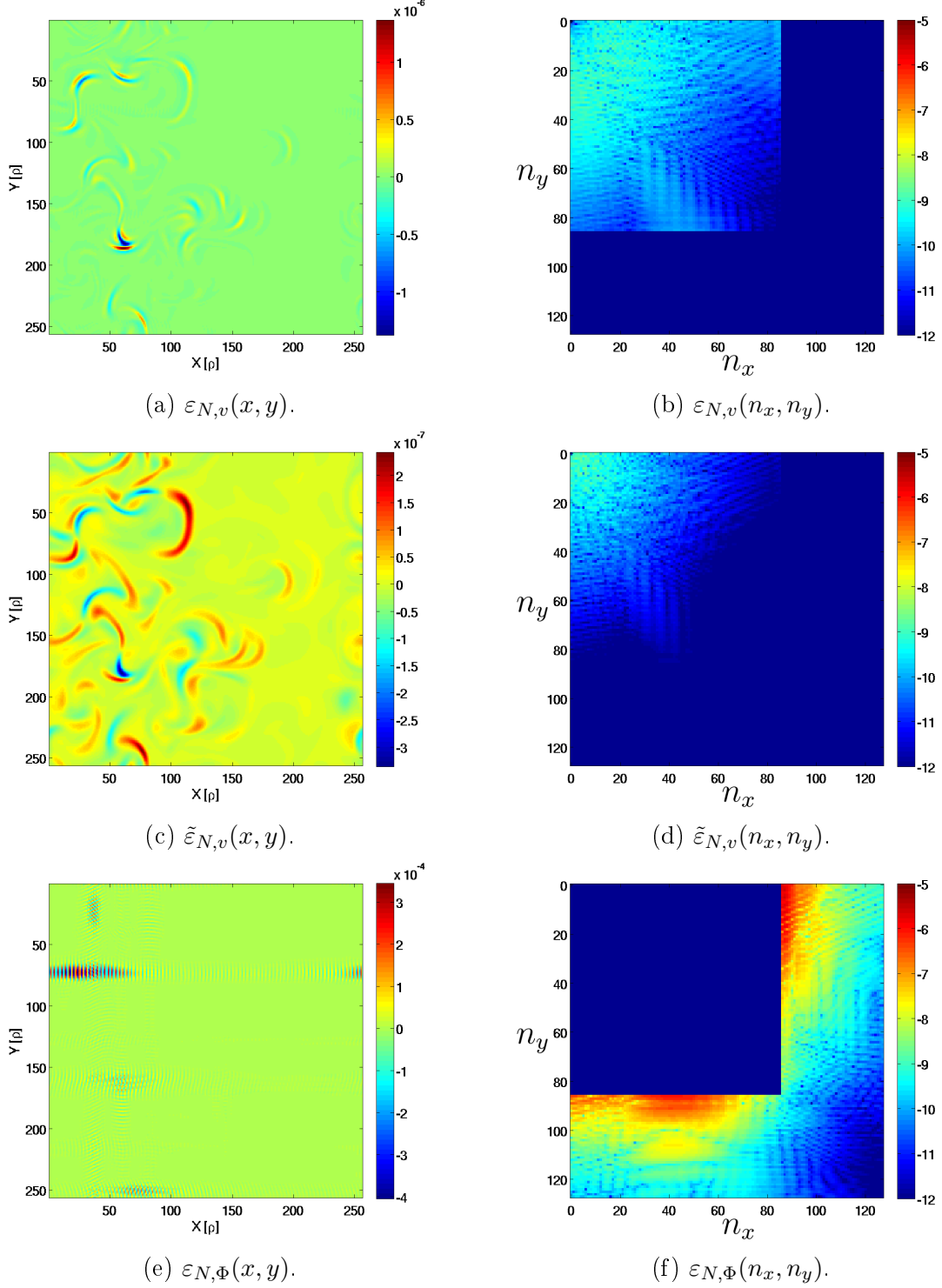


FIGURE 2.11 – Illustrations dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier des résidus issus de l'analyse PoPe d'une simulation type S1 (tab. 2.1). Voir les figures 2.7 et l'annexe A.1 pour plus d'illustrations.

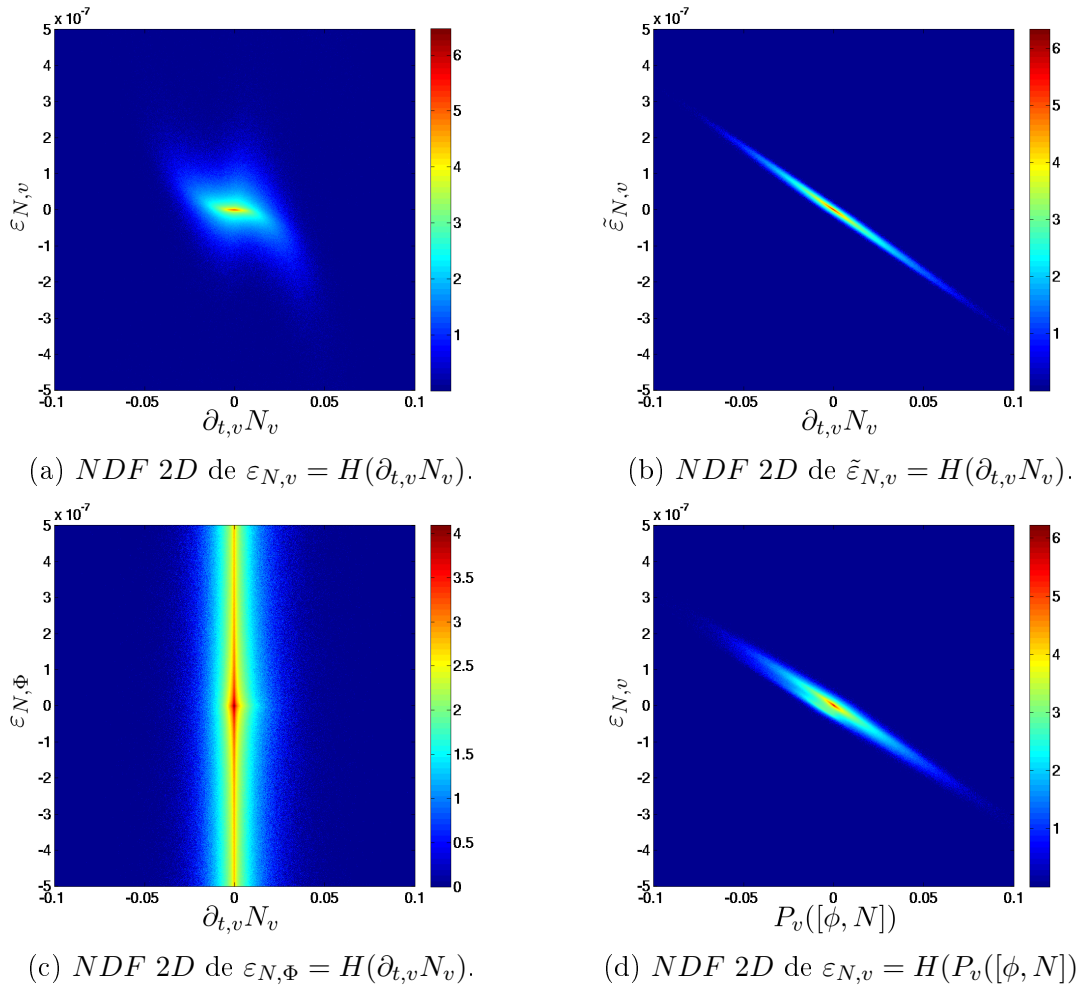


FIGURE 2.12 – Illustrations de NDF à 2 dimensions en \log_{10} . Mise en évidence de relations h entre les deux dimensions considérées. Simulation type S1 (tab. 2.1).

Cette erreur ne peut être que "quasiment linéaire" et non "simplement linéaire" car dans le second cas, elle reviendrait directement à modifier $\tilde{\alpha}$ d'un facteur $1/(1+p)$. Une telle correction aurait été détectée par PoPe. En fait, l'étude de la figure 2.12d illustre la forte corrélation entre le crochet de Poisson et l'erreur. Les NDF des autres opérateurs O_i , ou de leur somme, ne forment qu'un patatoïde sans corrélation significative. La principale source de l'erreur est donc le calcul du crochet de Poisson, le terme apportant la plus grande contribution à la dynamique en termes d'enrichissement du spectre et d'intensité. Cette erreur est 7 ordres de grandeurs inférieure à l'intensité de la dynamique pour une simulation S1 standard (voir tab. 2.1). La formulation eq.(2.16) qui a conduit à l'introduction de $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\varepsilon}$ prend tout son sens. Elle permet ici de comprendre la structure de l'erreur en la décomposant plus finement, en soustrayant toute contribution linéaire des opérateurs O_i à ε . Si la recherche de la structure de l'erreur est une finalité, il est possible d'étendre l'analyse de PoPe en ajoutant de nouveaux opérateurs à la liste testée pour capturer cette information supplémentaire. Dans ces conditions, par projections successives, le résidu se réduirait à un bruit.

2.7.3 Procédure de vérification de code

La procédure à suivre pour vérifier un code est résumée ici. Une fois la mise en place des diagnostics effectuée et le script de post-traitement écrit (section 2.6), la procédure à suivre se résume à 2 étapes. La première consiste à vérifier que nous disposons de tous les éléments pour faire la vérification. La seconde est la vérification elle-même.

La première étape utilise une unique simulation standard et a pour objectif de détecter l'équation résolue par le code. Cette étape préliminaire permet également de révéler les possibles erreurs d'implémentation de PoPe. Les principaux points à vérifier sont :

- Le calcul de la dérivée temporelle qui fait appel à l'inconnue à différents pas de temps. Dans le cas où le diagnostic serait effectué trop souvent (Δt_{diag} trop court) par rapport au pas de temps utilisé pour estimer la différence finie (Δt_{DF}), un chevauchement empêche d'utiliser la méthode économe en RAM présentée en annexe B sous peine de donner des résultats faux mais parfois vraisemblables.
- L'estimation des dérivées spatiales et la prise en compte de la géométrie pour l'estimation des termes de l'équation vérifiée (les O_i) peut montrer des problèmes de définitions. Pour être sûr de ne pas faire d'erreur au niveau de l'estimation des jacobiens, la méthode la plus directe est de demander au code de calcul de sauvegarder la position de chaque point au moins une fois. De cette façon, le jacobien pourra être déterminé numériquement sans ambiguïté.
- Il est important que toutes les données utilisées par PoPe soient bien synchronisées. La dérivée temporelle (membre de droite de eq.(2.29)) et les opérateurs utilisés pour construire la matrice doivent être mesurés au même instant t . Prenons l'exemple d'une intégration temporelle à base de prédicteur-correcteur. La phase correctrice consiste à estimer le champ d'advection ϕ à l'instant $t + \Delta t/2$ pour advecter $f(t)$ jusqu'à $f(t + \delta t)$. A la fin de cette étape, f et ϕ ne sont pas synchrones : $\phi =$

$\phi(t + \Delta t/2)$ et $f = f(t + \Delta t)$. Il faut donc attendre le début de la phase de prédiction de l'itération suivante, $i + 1$, pour disposer de $\phi = \phi(t + \Delta t)$ et de $f = f(t + \Delta t)$.

- Un dernier point à discuter est la précision des sauvegardes utilisées. La méthode PoPe permet en effet de vérifier une équation avec une erreur relative très faible, jusqu'à 10^{-12} dans le cas de TOKAM2D. Il faut donc sauvegarder l'ensemble des données avec la précision utilisée lors des simulations. Dans le cas de TOKAM2D, le paramètre Λ utilisé dans le code est donné par $\Lambda = \frac{1}{2} \ln(4 \frac{m_i}{m_e} / (1 + \frac{T_i}{T_e}))$. Le résultat de ce calcul en double précision intervient ensuite dans les puits (eq.(2.1)) via une exponentielle $e^{\Lambda - \phi}$. Initialement, les sorties de TOKAM2D ne contenaient que $\Lambda = 3.875$ (sur 4 chiffres significatifs) ce qui implique une incertitude de l'ordre de $e^{\pm 0.001} \simeq 0,1\%$ sur le poids des puits. Cette erreur peut paraître faible, mais elle empêche l'erreur relative de passer la barre des 10^{-4} , au lieu d'atteindre jusqu'à 10^{-12} .

La seconde étape consiste à vérifier l'ordre des méthodes utilisées. Plusieurs simulations, utilisant des paramètres physiques identiques, sont effectuées en faisant varier les paramètres des méthodes numériques. Il est alors possible d'ajouter une dépendance en Δx , Δy ou Δt aux poids $\tilde{\alpha}$. Cette étude doit permettre de retrouver les régimes de convergence asymptotiques des méthodes numériques utilisées. De manière consistante, on peut alors déterminer le maillage nécessaire pour qu'une simulation ait le niveau de fiabilité souhaité.

2.7.4 Vérification du code TOKAM 2D

Dans cette section, la première équation eq.(3.1) du code TOKAM 2D est vérifiée en régime non linéaire (turbulent) avec la méthode PoPe. Les simulations utilisées sont du type S2 (voir tab. 2.1). En choisissant des paramètres physiques conduisant à une dynamique lente et à grande échelle on peut utiliser une discrétisation largement sur-résolue à moindre coût. Les méthodes numériques utilisées dans le code TOKAM 2D sont une approche pseudo-spectrale en espace et un intégrateur temporel de type prédicteur-correcteur à l'ordre 2. Soit N_x et N_y le nombre de points dans les directions x et y , soit N_t le nombre d'itérations temporelles, le temps de calcul de l'ensemble de l'outil est en $\mathcal{O}(N_x N_y N_t)$. Le coût en $N \log(N)$ des transformées de Fourier n'est pas perceptible dans les conditions d'utilisation courantes. Un filtre de dealiasing forçant à zéro 1/3 du spectre est utilisé après chaque calcul non linéaire.

2.7.4.1 Convergence du prédicteur-correcteur en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$

Pour mettre en évidence le prédicteur-correcteur à l'ordre 2 de TOKAM2D, plusieurs simulations avec différentes valeurs de Δt sont effectuées. Ainsi, il est possible de paramétrer par Δt les résultats de PoPe : $\tilde{\alpha}(\dots, \Delta t)$ et $\varepsilon(\dots, \Delta t)$. Sur la figure 2.13a l'erreur relative $< |\delta \alpha_i(t, \Delta t)| >_t / |\alpha_i|$ est représentée pour le poids $-\mathbf{1}_{[\phi, N]} = -1$. Le choix du crochet de Poisson est le plus intéressant car c'est le terme de plus grande amplitude, il est celui qui contribue le plus à enrichir le spectre et l'existence d'un second crochet de

Poisson $[\phi, W]$ dans la liste des opérateurs testés met en avant la contrainte de la non colinéarité. Le comportement des 8 poids est qualitativement similaire. Les mêmes courbes peuvent être obtenues en étudiant l'écart type de la distribution des $\tilde{\alpha}$. L'estimation des opérateurs utilisant des dérivées partielles est faite soit en utilisant des séries de Fourier (rouge), ce qui est la méthode utilisée par le code et la méthode la plus précise, soit en utilisant des différences finies à l'ordre 2 (vert), à l'ordre 4 (bleu) et à l'ordre 6 (noir). Ces différents ordres ont été choisis car les différences finies centrées se sont montrées bien plus précises que les différences décentrées pour des raisons de synchronisation dans l'espace entre les différents champs et les dérivées. Enfin, les courbes utilisant des symboles circulaires ('o') ne font pas appel au filtre P_v pour le calcul des O_i alors que les courbes utilisant des étoiles ('*') le font. La résolution dans l'espace est $N_x \times N_y = 64 \times 64$. A chaque instant, l'ensemble des points du maillage est utilisé pour effectuer le traitement PoPe.

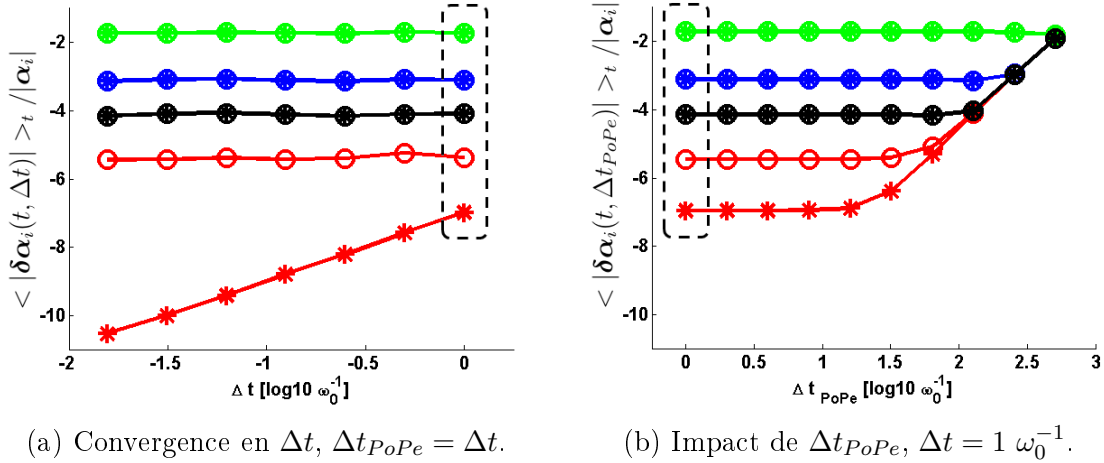


FIGURE 2.13 – Erreur relative du poids $-1_{[\phi, N]} = -1 [\log_{10}]$ en fonction de $\Delta t [\log_{10}]$ et $\Delta t_{PoPe} [\log_{10}]$ du code TOKAM2D sur une simulation S2 (voir tab. 2.1). Estimation des dérivées partielles avec des transformées de Fourier (courbes rouges) et des différences finies (ordre 2 en vert, 4 en bleu, 6 en noir). Utilisation de P_v (étoiles), sans P_v (cercles). Les cadres en trait discontinu noir représentent le même ensemble de points sur les deux graphiques.

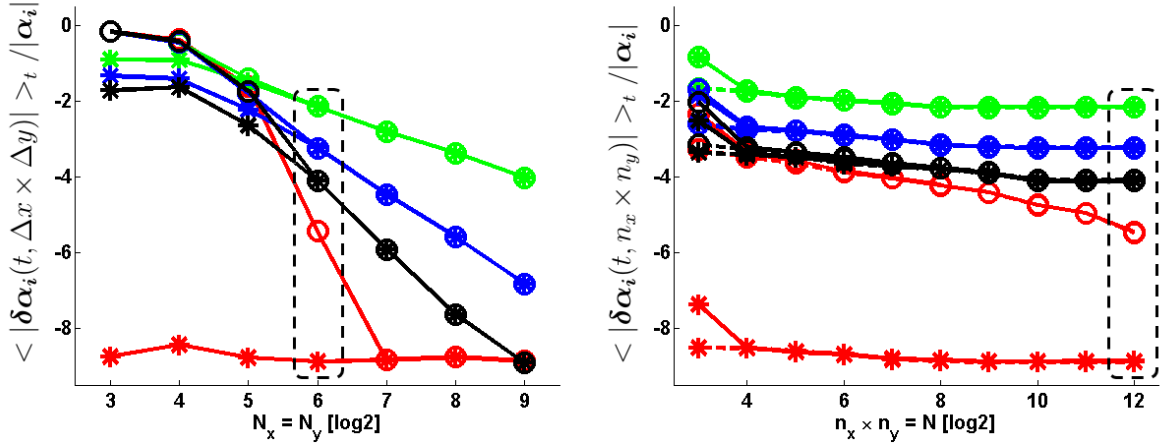
La courbe qui marque le plus est celle de l'analyse utilisant les séries de Fourier et le filtre (rouge et '*') : on observe une dépendance claire de l'erreur vis à vis du pas de temps d'intégration. La dépendance de l'erreur en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ est retrouvé sur presque deux ordres de grandeur en Δt (donc 4 ordres de grandeur pour l'erreur), le tout en régime turbulent. La courbe utilisant les séries de Fourier sans le filtre P_v montre l'importance de ce dernier. Sans filtre, l'estimation des opérateurs O_i ne permettrait pas d'ignorer l'erreur $\varepsilon_{\Phi, N}$. Cette erreur se projette sur les opérateurs, augmentant l'erreur sur les coefficients $\tilde{\alpha}$ au point de masquer l'amélioration de la précision avec le pas en temps (voir figures Fig. 2.15, colonne gauche). L'ordre 2 n'est retrouvé que lorsque la partie valide de l'erreur ε_v est plus importante que la partie non valide de l'erreur ε_Φ , soit pour des valeurs de $\Delta t \in [2, \infty[$ dans le cas étudié. La discrétisation spatiale étant peu raffinée,

l'utilisation des différences finies dans l'évaluation des opérateurs introduit des erreurs supplémentaires par rapport à Fourier. Retrouver l'ordre 2 nécessiterait d'utiliser des Δt encore supérieurs. Avec l'utilisation des séries de Fourier, l'ensemble des opérateurs présents dans l'équation donne les mêmes résultats à l'épaisseur du trait près : la convergence en Δt de tous les opérateurs est la même. Ceci est remarquable étant donné les 5 ordres de grandeur séparant le poids $-\mathbf{1}_{[\phi, N]} = -1$ et le poids $-\sigma \simeq 1, 14 \times 10^{-5}$ (voir le tableau tab. 2.2). Même si l'erreur relative ne peut être utilisée pour les opérateurs tels que $\alpha_i = 0$, la dépendance de l'erreur absolue par rapport à Δt est la même. En ce qui concerne le choix des opérateurs utilisés dans l'analyse PoPe, se restreindre à la liste des 4 opérateurs présents dans l'équation eq.(3.1) (au lieu d'utiliser la liste des 8 opérateurs présents dans les équations eq.(3.1 - 3.2)) n'a qu'un impact négligeable. Ce point est illustré figure 2.14b.

Une seconde étude consiste à faire varier le pas de temps Δt_{PoPe} qui est utilisé pour déterminer les dérivées temporelles issues du code TOKAM 2D (voir Fig. 2.13b et Fig. A.5). Ce paramètre contrôle la qualité de la dérivée temporelle de la même façon que le filtre ou les différences finies et les séries de Fourier contrôlent la qualité des estimations des opérateurs O_i . Pour la simulation considérée, une large plage de Δt_{PoPe} donne des résultats identiques. Ce n'est qu'à partir de $\Delta t_{PoPe} = 32 \omega_0^{-1}$ qu'une tendance en Δt_{PoPe}^4 apparaît, c'est-à-dire une pente de coefficient directeur 4 en échelle logarithmique. Cette pente est plus raide que celle de l'intégrateur temporel à l'ordre 2 (Fig 2.13b). Elle vient simplement de l'utilisation de différences finies à l'ordre 4 pour estimer les dérivées temporelles utilisées en entrée de la méthode PoPe. Il est suffisant de fixer $\Delta t_{PoPe} = \Delta t$ (lorsque le pas d'intégration temporelle Δt est en adéquation avec la dynamique simulée) pour que le diagnostic de la dérivée temporelle de PoPe n'entache pas les résultats du code à vérifier. Il est important de souligner que le pas de temps d'intégration Δt a un impact en ordre 2 sur $\tilde{\alpha}$, ε_v et $\tilde{\varepsilon}_v$, alors que l'impact sur $\varepsilon_{\Phi, N}$ reste marginal dans le cas de TOKAM2D. Réduire le pas de temps d'intégration ne permet en aucun cas de tenir compte des modes que le filtre force à zéro. Enfin, une réflexion sur la nature explicite ou implicite d'une intégration temporelle apporte un nouvel éclairage sur la dynamique non valide ε_{Φ} . Le cas d'une méthode explicite (comme TOKAM2D), la CFL numérique impose un pas d'intégration temporelle relativement faible, donc des déplacements relativement faibles à chaque pas de temps. Cette restriction, associée à une discrétisation spatiale adaptée, évite des erreurs de type "catastrophe du gradient" pour la recherche de pieds de caractéristiques par exemple. Dans le cas d'une méthode implicite, le nombre minimum d'interactions nécessaires par unité de temps ou simplement une CFL "physique" doit remplacer l'absence de CFL numérique. Un code explicite aura tendance à peu filtrer la dynamique dans la dimension temporelle, alors qu'un code implicite sans CFL pourra dangereusement, et sans avertissement, filtrer la dynamique valide et accroître ε_{Φ} de façon quantitative et qualitative.

2.7.4.2 Précision de l'approche pseudo-spectrale en $\Delta x \times \Delta y$

La méthode pseudo-spectrale utilisée dans TOKAM est classique : les termes non linéaires sont calculés dans l'espace réel puis intégrés au cours du temps dans l'espace de Fourier, en même temps que les termes linéaires. En particulier, les dérivées spatiales des crochets de Poisson sont estimées dans l'espace de Fourier avant d'être multipliées dans l'espace réel. Cette méthode allie la précision d'une dérivée analytique dans l'espace de Fourier (sans utiliser de différences finies) et le faible coût d'un produit dans l'espace réel (et non une convolution dans l'espace de Fourier). De la même façon que pour l'étude de la convergence en Δt , nous utilisons ici un ensemble de simulations effectuées dans une boîte de taille $(L_x \times L_y)$ et basées sur différents couples $(N_x \times N_y)$ pour estimer la convergence en $\Delta x \times \Delta y$.



(a) Convergence en $N_x = N_y$. ($N = N_x \times N_y$) (b) Convergence en N . ($N_x = N_y = 64$)

FIGURE 2.14 – Erreur relative du poids $-1_{[\phi, N]} = -1 [\log_{10}]$ en fonction du nombre de points utilisés pour une simulation TOKAM2D $N_x \times N_y [\log_2]$ (Fig. 2.14a) et du nombre de points utilisés pour le traitement de PoPe $N = n_x \times n_y [\log_2]$ (Fig. 2.14b). Les simulations sont du type S2 (voir tab. 2.1). Estimation des dérivées partielles avec des transformées de Fourier (courbes rouges) et des différences finies (ordre 2 en vert, 4 en bleu, 6 en noir). Utilisation de P_v (étoiles), sans P_v (cercles). Les courbes discontinues Fig. 2.14b sont estimées en utilisant les 4 opérateurs présents. Les cadres en trait discontinu noir représentent le même ensemble de points sur les deux graphiques.

Sur la figure 2.14a l'erreur relative $<|\delta \alpha_i(t, \Delta x \times \Delta y)| >_t / |\alpha_i|$ est représentée pour le poids $-1_{[\phi, N]} = -1$. Le code de couleurs et de symboles est le même que pour la figure 2.13a. Le pas d'intégration temporelle est $\Delta t = 1 \omega_0^{-1}$. L'ensemble des points du maillage est utilisé à chaque pas de temps pour effectuer le traitement PoPe. Comme précédemment, l'utilisation de la transformée de Fourier donne les meilleurs résultats (rouge et '*') : on observe une indépendance claire de l'erreur vis à vis de la discrétisation spatiale. Cela traduit le fait que l'erreur sur la partie valide de la dynamique d'un code pseudo-spectral ne dépend pas du nombre de modes utilisés. Les calculs ne manipulent que des amplitudes de modes, ce qui permet d'avoir une approche presque analytique,

sans les approximations qui caractérisent les différences finies. Par ailleurs, lorsque le filtre P_v n'est pas utilisé pour les opérateurs O_i dans le post-traitement, on peut mesurer une convergence effective qui prend en compte l'erreur due à la dynamique non valide ε_Φ , dynamique qui elle dépend du nombre de modes. Les approximations basées sur les différences finies convergent avec l'ordre attendu à partir de $N_x = N_y = 2^6$ environ. Pour un maillage moins bien discrétisé les hypothèses justifiant un développement de Taylor ne sont plus satisfaites. Lorsque le filtre P_v n'est pas utilisé, on peut observer une convergence plus rapide que le taux théorique. Cette accélération est en fait due à une forte diminution de l'erreur ε_Φ avec le pas du maillage. Pour la méthode à l'ordre 6, la résolution $N_x = N_y = 2^9$ est celle obtenue par les transformées de Fourier utilisée dans le code. La décroissance est donc stoppée car la méthode de calcul externe des opérateurs atteint alors une précision supérieure à celle du schéma du code qui devient alors la source dominante de l'erreur.

Pour valider l'impact de la résolution $N_x \times N_y$ sur les résultats du code, il est nécessaire de mettre en évidence auparavant un éventuel impact du nombre de points $N = n_x \times n_y$ utilisés pour résoudre le système matriciel au cœur de PoPe (voir eq.(2.29)). C'est alors le nombre de points sélectionnés lors de la résolution du système linéaire qui varie, et non le nombre de points utilisés pour estimer les opérateurs O_i : le calcul des dérivées est effectué sur le maillage complet pour ne pas réduire leur qualité, avant de ne sélectionner qu'un sous ensemble des points. Sur la figure 2.14b, une unique simulation de type S2 (voir tab. 2.1) sur un maillage $(N_x \times N_y) = (64 \times 64)$ est étudiée en utilisant un quadrillage de n_x points dans la direction x et n_y points dans la direction y . A une valeur de $N = n_x \times n_y$ on peut associer différents couples (n_x, n_y) . L'analyse montre une légère dépendance vis à vis de la répartition des N points dans l'espace : une répartition homogène en deux dimensions est préférable sans être critique. Sur la figure 2.14b c'est la valeur de l'erreur la plus faible parmi les différents couples possibles qui est retenue.

Comme cela est discuté dans l'annexe C, le système à résoudre n'est pas dans l'espace $x \times y$ mais dans l'espace défini par la liste des opérateurs utilisés, ici à 8 dimensions. L'amélioration du conditionnement de la matrice se fait en choisissant des points présentant des dynamiques différentes et qui ne sont pas nécessairement éloignés dans l'espace $(x \times y)$. Je n'ai pas cherché à définir des ensembles de points optimaux dans la mesure où l'erreur dépend peu de ce choix.

Le code des couleurs et symboles de la figure 2.14b est le même que pour la figure 2.14a. Les courbes traitillées correspondent à une analyse basée sur les 4 opérateurs présents dans l'équation étudiée uniquement : les 4 autres nuls ne sont pas considérés. Les courbes continues et discontinues se superposent parfaitement à l'exception du dernier point $N = 2^3$ où un décrochage d'un ordre de grandeur pour les modèles à 8 opérateurs est observable. En utilisant seulement $N = 16$ points d'un maillage $64 \times 64 = 4096$, la détection de l'équation de TOKAM 2D basée sur 8 opérateurs (dont 4 ont un poids théoriquement nul) est réalisée avec une précision du même ordre qu'une étude basée sur $N = 4096$ points. En ce qui concerne les approches basées sur des différences finies, la qualité de l'étude reste relativement stable, environ 1 ordre de grandeur est perdu

par rapport à l'approche utilisant le plus de points. Il est important de rappeler que les dérivées sont calculées sur le maillage complet $(N_x \times N_y) = (64 \times 64)$ et que la sélection à un sous ensemble de points est ultérieure. Cette relative indépendance permet de garantir que l'étude sur l'impact de $N_x \times N_y$ n'est que marginalement entachée d'une erreur imputable au nombre de points $N = n_x \times n_y$ utilisés pour l'analyse PoPe. En particulier, l'erreur obtenue avec les différences finies est identique dans la plage $N \in [2^{10} - 2^{12}]$, les simulations faites avec des résolutions $N_x = N_y \geq 5$ ne dépendent pas du nombre de points utilisés pour l'analyse avec PoPe.

Cette propriété est encourageante pour les codes utilisant des maillages plus importants et difficilement stockables dans leur globalité pour faire un traitement complètement hors ligne. Sauvegarder un sous ensemble des points (et l'estimation des opérateurs sur ce sous ensemble) peut suffire à établir un diagnostic très précis.

Il est intéressant d'illustrer l'impact de la discrétisation $N_x \times N_y$ dans l'espace par rapport à la nature de l'erreur non valide ε_Φ . Sur la figure 2.15 on compare $P_v(\partial_t \tilde{N})$, $P_v(\varepsilon_N)$, $P_v(\tilde{\varepsilon}_N)$ et $\varepsilon_{N,\Phi}$ pour deux résolutions : $N_x = N_y = 64$ pour la colonne de gauche, $N_x = N_y = 256$ pour la colonne de droite. La simulation basée sur le maillage 256×256 est dite sur-résolue car le spectre dans l'espace de Fourier atteint la précision relative de la machine, équivalent à un zéro numérique, pour un tiers des valeurs : le filtre P_v est donc implicite, à cause de la précision relative finie. Pour une dimension de boîte donnée $(L_x \times L_y)$, augmenter le nombre de points $(N_x \times N_y)$ permet de simuler des nombres d'ondes plus élevées. On retrouve cette propriété en comparant les deux colonnes d'images : les faibles vecteurs d'ondes ont le même comportement avec les deux résolutions, les vecteurs d'ondes élevés n'apparaissent pas dans la colonne de gauche. Alors que les erreurs ε_v et $\tilde{\varepsilon}_v$ sont comparables dans le carré de 21×21 modes communs aux deux résolutions, l'erreur ε_Φ change radicalement. En fait, la dynamique non valide ε_Φ du cas sous résolu devient une dynamique valide dans le cas sur-résolu car le spectre associé au premier maillage est totalement inclus dans les deux tiers non filtrés du spectre du second maillage. Lorsque la discrétisation d'une simulation est discutée, la minimisation de l'erreur non valide ε_Φ est un critère important.

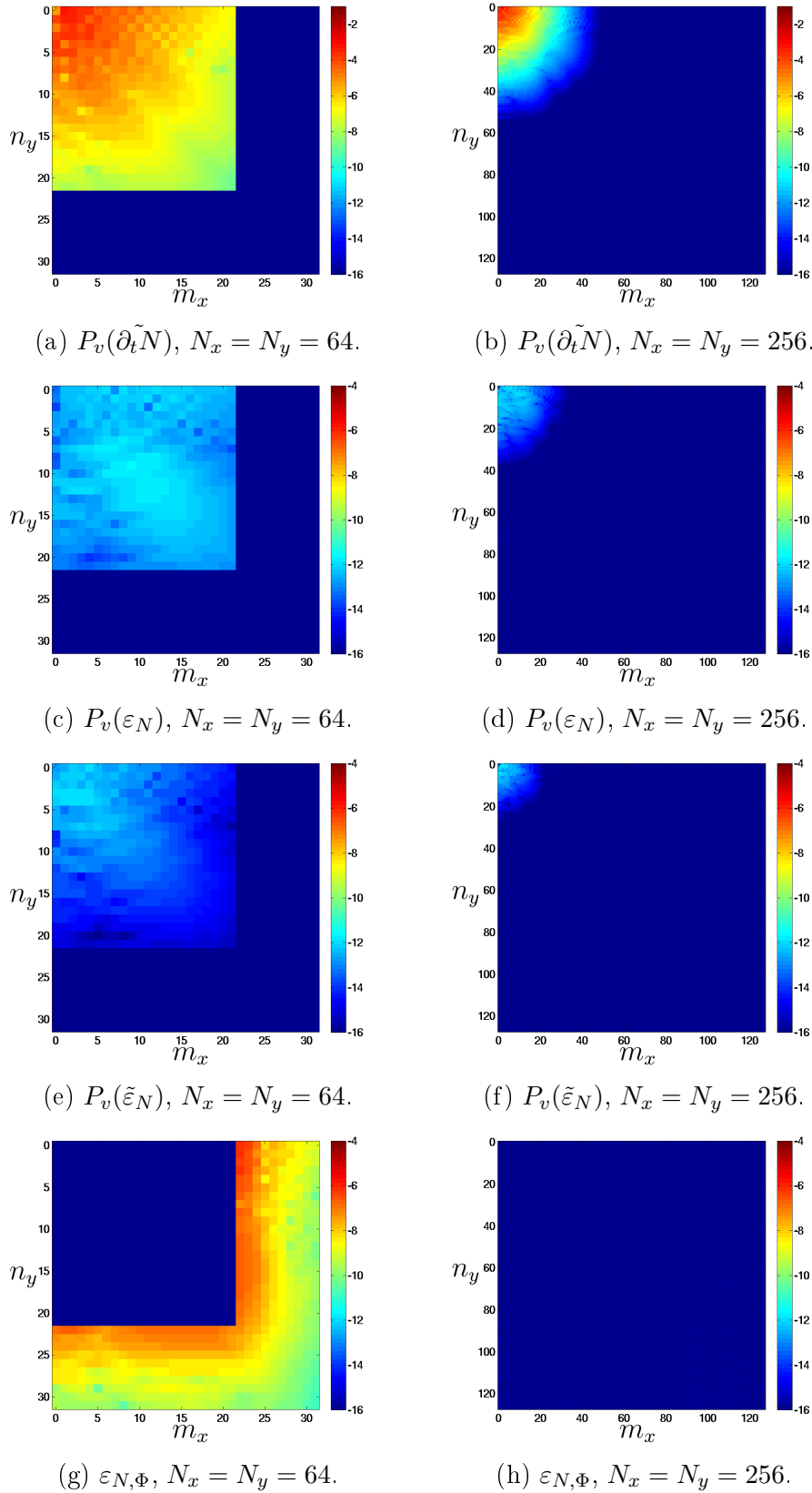


FIGURE 2.15 – Illustrations dans l'espace de Fourier de $P_v(\partial_t \tilde{N})$, $P_v(\varepsilon_N)$, $P_v(\tilde{\varepsilon}_N)$ et $\varepsilon_{N,\Phi}$ pour deux valeurs de résolution $N_x = N_y = N$: $N = 64$ pour la colonne de gauche, $N = 256$ pour la colonne de droite. Simulation type S2 (tab. 2.1). Ces illustrations dans l'espace réel sont présentes Fig. A.6

2.7.4.3 Résumé de la vérification TOKAM2D avec PoPe

Le choix d'une discrétisation pour simuler une physique donnée répond aux contraintes de minimisation de l'erreur et de minimisation du coût de calcul. Dans le cas de TOKAM 2D, cette minimisation est faite sous la contrainte, presque binaire, d'une CFL garantissant le fonctionnement (ou non) de l'intégration temporelle. Pour les simulations étudiées, les composantes valide ε_v et non valide ε_Φ de l'erreur ont jusqu'à plusieurs ordres de grandeurs de différences. Le souhait de décrire un plus large spectre de modes (réduire ε_Φ) en utilisant un maillage plus fin (diminuer $\Delta x \times \Delta y$) tout en diminuant la qualité de l'intégration temporelle (augmenter Δt) pour ne pas faire exploser le coût de calcul est un souhait légitime. Cependant, la CFL ne permet pas de dégrader librement l'intégration temporelle : la méthode numérique diverge pour un pas de temps trop grand. Nous ne disposons donc pas de ce levier pour ajuster le ratio "précision" / "temps de calcul". Pour intégrer cette possibilité, l'ajout à TOKAM2D d'une méthode numérique tolérant un pas d'intégration plus grand est envisagé.

L'utilisation du filtre P_v est un avantage important qui permet de filtrer toute dynamique trop riche pour être représentée par la discrétisation. Cet outil permet donc d'être dans une situation de sous résolution numérique sans propager d'erreurs qui seraient liées à la partie non admissible de la dynamique. Pour certains systèmes, la décroissance rapide du spectre fait que la précision finie des ordinateurs filtre le spectre sans même utiliser d'opérateur P_v explicite. Pour d'autres systèmes dont le spectre décroît lentement (dynamique à petite échelle des systèmes non collisionnels), utiliser un maillage permettant au code de se filtrer lui-même est extrêmement coûteux. L'utilisation d'un filtre explicite est alors recommandée. Dans le cas de TOKAM2D, nous verrons section 3.4.3 qu'une forte sous résolution permise par le filtre P_v peut n'entacher que faiblement les simulations tout en diminuant grandement le temps de calcul.

La méthode PoPe a permis de garantir la bonne implémentation des méthodes utilisées dans le code TOKAM2D. Il est ainsi possible de prédire quelle discrétisation permettra de réaliser une simulation fidèle. Néanmoins, comme une mesure précise de l'erreur est possible pour toutes les simulations, il n'est pas indispensable de retrouver la convergence complète du code pour décider si une simulation particulière est suffisamment résolue. Vérifier une simulation est équivalent à vérifier si le code a atteint un objectif sur l'erreur tolérable. Vérifier le code complet est équivalent à vérifier la bonne utilisation des moyens de calcul en garantissant la bonne implémentation des méthodes et leur convergence théorique.

D'un point de vu physique, l'hypothèse "poids constants dans l'espace et au cours du temps" est faite dans ce modèle réduit pour des raisons de simplicité et non de réalisme. La grande précision de TOKAM2D, bien que idyllique en termes de vérification de code, n'est peut-être pas nécessaire en terme de physique. Ainsi, une méthode numérique moins précise peut tout à fait être utilisée dans la mesure où les déviations observées sur les poids α et le résidu ε semblent "physiquement raisonnables".

2.7.5 Procédure de réduction de modèles

La réduction d'un modèle peut être faite avec différentes approches. Il est possible de diminuer le nombre de degrés de liberté en supprimant une dimension ou en répartissant cette perte d'information en modifiant la discrétisation. Une autre approche consiste à simplifier (voire supprimer) certains des opérateurs utilisés dans l'équation étudiée. Dans les deux cas, l'étude de ε et ε_Φ issue de PoPe peut guider cette analyse en transcrivant l'impact de toute modification sur la dynamique du système considéré. De façon générale, la réduction de modèle permet deux choses :

- Améliorer la compréhension théorique d'un modèle en identifiant les ingrédients importants (aussi bien les opérateurs que les degrés de libertés)
- Accélérer le code en évitant d'estimer la dynamique des informations que l'on considère comme superflues avec une décomposition sur des modes orthogonaux [Y. C. Liang 2002a, Y. C. Liang 2002b] ou en utilisant une méthode plus avancée basée sur des tenseurs [Kormann 2014].

Je me suis intéressé à la simplification d'équations en supprimant un champ et une dimension. Ici, le but est de représenter le transport turbulent de l'équation suivante :

$$\partial_t N(x, y, t) = -[\phi(x, y, t), N(x, y, t)] + D\Delta N(x, y, t) + \mathcal{S} - \mathcal{P}$$

Le transport turbulent est généré par le crochet de Poisson, c'est-à-dire la divergence à deux dimensions du flux convectif turbulent. Pour atteindre l'objectif fixé, il faut donc ramener le problème à une dimension, et le restreindre au champ moyen de densité $\mathcal{N}(x, t) = \langle N(x, y, t) \rangle_y$. On établit alors la relation suivante :

$$\partial_t \mathcal{N}(x, t) - \langle \mathcal{S} \rangle_y + \langle \mathcal{P} \rangle_y = \partial_x (-\mathbf{V} \mathcal{N}(x, t) + \mathbf{D} \partial_x \mathcal{N}(x, t)) + \varepsilon_\Phi \quad (2.31)$$

Dans cette formulation nous avons fait apparaître deux poids $-\mathbf{V}$ et \mathbf{D} associés aux deux opérateurs $\mathbb{I}(\mathcal{N}(x, t))$ et $\partial_x \mathcal{N}(x, t)$. En déterminant $\partial_t \mathcal{N}(x, t) = \langle \partial_t N(x, y, t) \rangle_y$ et $\mathcal{N}(x, t) = \langle N(x, y, t) \rangle_y$ à partir des diagnostics d'une simulation complète, la méthode PoPe permet de déterminer les coefficients de transport $-\mathbf{V}$ et \mathbf{D} optimaux pour faire correspondre le modèle réduit et les données issues du modèle complet.

Le point important en terme de réduction est l'objectif que nous souhaitons atteindre avec le modèle réduit : quelles propriétés doivent être conservées ? En deçà de quelle borne doit rester ε_Φ ? Par exemple, le modèle proposé ici ne permet pas de reproduire les avalanches caractéristiques des simulations de TOKAM2D. Le système converge vers un équilibre entre le puits et la source sans générer de chaos ou de turbulence.

Une seconde possibilité de réduction avec plus de degrés de liberté pour reproduire le comportement d'avalanche est donnée par :

$$\partial_t \mathcal{N}(x, t) - \langle \mathcal{S} \rangle_y + \langle \mathcal{P} \rangle_y = \partial_x (-\mathbf{V}(x, t) \mathcal{N}(x, t) + \mathbf{D}(x, t) \partial_x \mathcal{N}(x, t)) + \varepsilon_\Phi \quad (2.32)$$

Cette nouvelle formulation permet aux coefficients de transport de varier dans l'espace et le temps. En fait, ce nouveau modèle eq.(2.32) revient à déterminer plusieurs modèles eq.(2.31) à différents x . Ainsi, à l'aide d'un ensemble de systèmes utilisant $N = N_x = 2$ points, on peut déterminer $N/2$ valeurs de \mathbf{D} et $N/2$ valeurs de $-\mathbf{V}$ à chaque instant t . On obtient alors N équations avec N inconnues. Il existe donc deux profils $-\mathbf{V}(x)$ et $\mathbf{D}(x)$ qui à un t donné permettent de vérifier $\varepsilon_\Phi = 0$. Cela signifie que $\langle \partial_t N(x, y, t) \rangle_y - \mathcal{N}(x, t) = 0$. La nouvelle formulation modélise parfaitement le modèle complet, mais il faut maintenant arriver à prédire $-\mathbf{V}(x, t)$ et $\mathbf{D}(x, t)$ à partir des variables connues. Les nouveaux poids nécessitent donc de nouvelles équations. Cette approche passe d'une équation à 2 dimensions à trois équations à 1 dimension. Le gain reste important en terme de temps de calcul si on arrive à déterminer l'évolution des nouveaux poids $-\mathbf{V}(x, t)$ et $\mathbf{D}(x, t)$. L'analyse des coefficients $\mathbf{D}(x, t)$ montre qu'il existe des valeurs négatives ce qui n'est pas acceptable en physique. Il est important d'être guidé par un ensemble de propriétés que l'on souhaite conserver après réduction.

Les réductions de modèles effectuées avec la méthode PoPe sont présentées dans le chapitre 3 pour l'étude du code TOKAM2D et le chapitre 5 pour l'étude du code TERESA car leur enseignements sont de nature à améliorer la compréhension physique plus que la compréhension de la méthode PoPe.

2.7.6 Vers l'interprétation de données expérimentales

La partie vérification de modèle numérique peut être vue comme l'analyse d'une expérience numérique : nous connaissons les équations du code étudié et nous voulons les retrouver. La même étude peut être conduite sur une expérience "réelle" pour déterminer la capacité d'un modèle à en rendre compte. On parle de qualification de modèles (voir figure 2.2). La méthode PoPe permettrait de tester un ensemble de modèles dans le but de déterminer les mécanismes clefs cohérents avec les données expérimentales. Le but est de faire du rétro engineering des lois physiques, au lieu de faire le rétro engineering d'un outil de simulation. Le succès d'une telle analyse donnerait accès aux conditions nécessaires auxquelles devrait satisfaire un modèle physique pertinent.

Le procédé est le même que pour la vérification de code, les difficultés qui viennent s'ajouter sont : un bruit lié au dispositif de mesure, une plus grande inconnue sur la forme du modèle à retrouver et, en général, un nombre de points de mesure limité mais un nombre de points dans le temps beaucoup plus important. Il faut également prendre en compte des interférences possibles entre la mesure et le système étudié, soit sous forme d'une perturbation induite par la mesure, soit par des fonctions d'appareil.

2.7.6.1 Mise en place d'un test synthétique avec TOKAM 2D

Pour réaliser cet exercice, j'ai utilisé une simulation TOKAM 2D standard (type S1, voir tab. 2.1) à laquelle j'ai ajouté un bruit blanc d'une largeur de spectre f et dont l'écart-type est proportionnel à l'écart type σ_x du champ que l'on perturbe, multiplié par

un facteur r . Soit X une grandeur non bruitée, $X_{bruit} = X + r\sigma_X \sum_{k_x=-f, k_y=-f}^{f, f} e^{i(k_x x + k_y y)}$ (voir figure 2.16c). L'exercice d'ajout du bruit est paradoxal et discutable car dans le cas d'un traitement de données expérimentales, de nombreux algorithmes de réduction de bruit seraient utilisés.

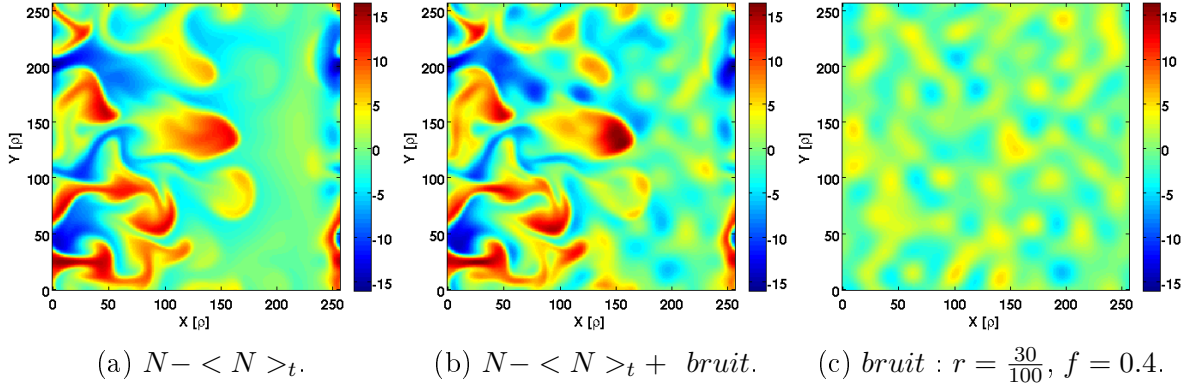


FIGURE 2.16 – Illustration de l'écart à l'équilibre du champ de densité (Fig. 2.16a) et de l'écart à l'équilibre perturbé (Fig. 2.16b) par un bruit (Fig. 2.16c). L'écart-type du bruit correspond à 30% de l'écart type de la densité totale. La largeur du spectre perturbé correspond à 6.25% du spectre calculé sur un maillage de 256×256 points.

2.7.6.2 L'élément clef est la forme du bruit

Des tests préliminaires ont montré que l'impact du bruit sur les grandeurs $\partial_t N$ et $\partial_t \phi$ est négligeable par rapport au bruit sur les grandeurs N et ϕ . Dans le second cas, la précision des dérivées partielles est largement dégradée. Ce point a motivé l'utilisation du bruit présenté ici, tel que la largeur du spectre de la perturbation est paramétrable : la forme du bruit impacte les résultats de l'étude. L'importance de l'échantillonnage en temps pour le calcul de la dérivée temporelle étant déjà traité section 2.7.4, cette mesure est faite avec une précision permettant de retrouver le poids des équations avec une erreur relative de 10^{-5} lorsque aucun bruit ne perturbe le système. Le choix des opérateurs O_i est restreint aux opérateurs présents dans l'équation étudiée (eq.(3.1)).

L'analyse PoPe a été effectuée en utilisant une série temporelle de grille de 32×32 points dans l'espace pour estimer les opérateurs. Les dérivées spatiales ont été estimées en utilisant des différences finies à l'ordre 2. Chacun des 1024 points de mesure est ainsi accompagné des 4 mesures (distantes de $d = L/256 = 1\rho$) pour former un maillage permettant l'utilisation de différences finies. Cette répartition des mesures semble plus réaliste que l'utilisation d'une grille régulière de 64×64 points pour estimer les dérivées dans l'espace de Fourier. Les premiers tests synthétiques ont donné des résultats comparables avec les deux approches : la supériorité de l'approche Fourier pour la vérification (voir Fig. 2.14a) est mise à mal par l'absence de l'utilisation du filtre (difficilement applicable dans ce contexte de qualification) et la présence d'un bruit. Diminuer la distance d , sans augmenter le nombre de mesures, permettra d'améliorer le calcul des dérivées spatiale tout en diminuant la sensibilité au bruit synthétique utilisé ici.

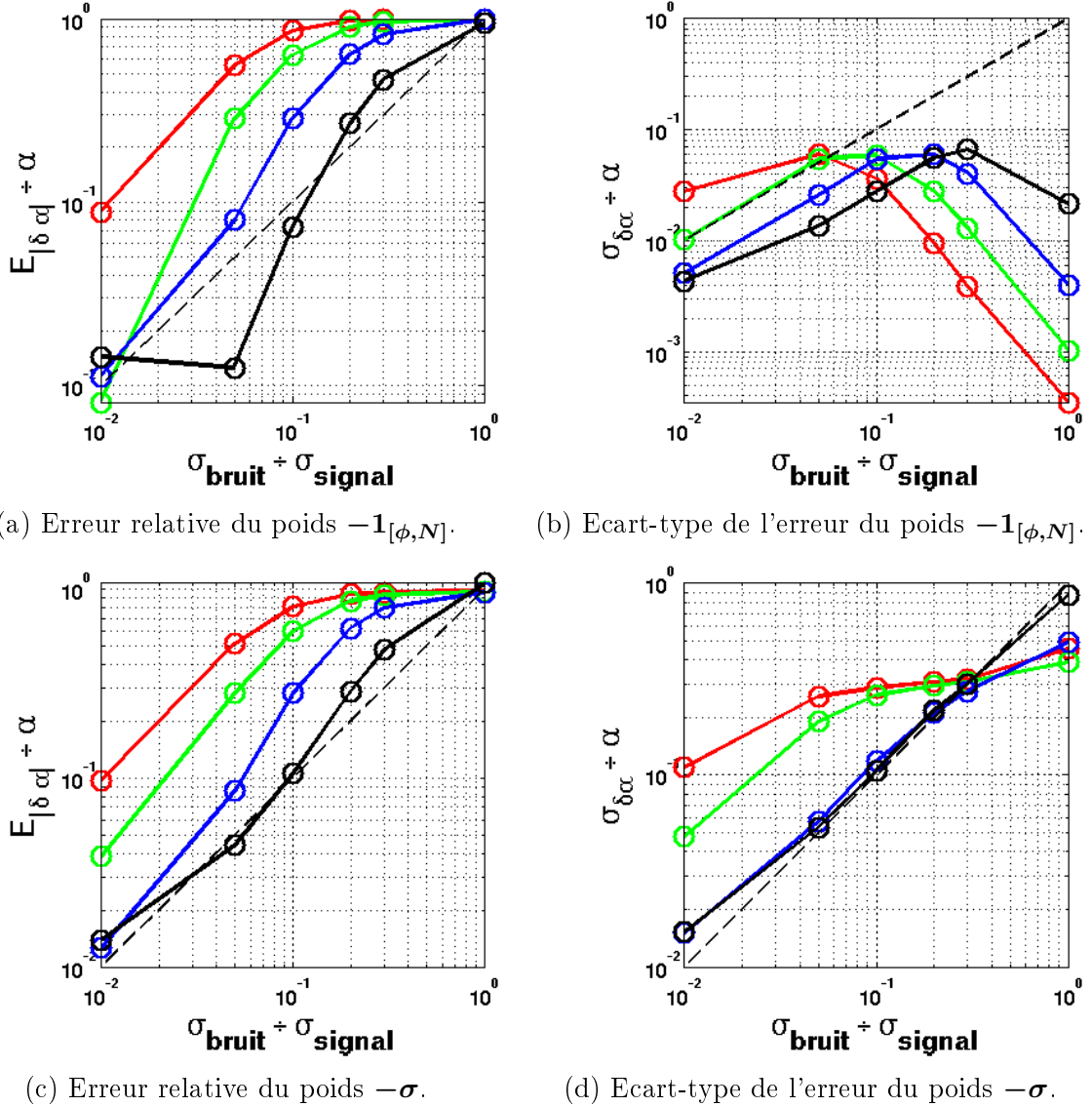


FIGURE 2.17 – Illustration de la convergence des poids du crochet de Poisson et du puits en norme 1 (espérance de $|\delta\alpha|$) et norme 2 (ecart-type de $\delta\alpha$) sur une simulation TOKAM2D standard (type S1, voir tab. 2.1) en utilisant 32×32 points pour l'étude PoPe. Courbe rouge : perturbation de 100% du spectre théorique (défini par une grille de 256×256 points), courbe verte : 25%, courbe bleue : 12.5%, courbe noire : 6.25% (voir Fig 2.16).

Les résultats de l'analyse PoPe en fonction du spectre du bruit et de son amplitude sont présentés figures Fig. 2.17. Selon la largeur du spectre perturbé, l'erreur sur l'estimation du poids des opérateurs peut varier de presque un facteur $\times 100$. Sans pré-traitement pour réduire le bruit, même l'utilisation des moindres carrés sur 1024 points (pour estimer 4 opérateurs) ne permet pas de descendre le niveau d'erreur relative en dessous du niveau du rapport bruit / signal (sauf pour le bruit ne perturbant que 6.25% du spectre théorique sur 256×256 points). Pour le crochet de Poisson, l'opérateur le

plus sensible à l'estimation des dérivées partielles, l'écart-type de l'erreur se stabilise à un niveau inférieur à l'espérance de l'erreur, même pour un rapport bruit / signal de 100% et une largeur de spectre perturbée à 100%. Cette mesure traduit le fait que la fonction de probabilité de densité de ce poids reste étroite mais glisse dans son ensemble vers une valeur erronée. Le bruit perturbe cet opérateur au point qu'un post-traitement des densités de probabilité ne permettra pas de retrouver la valeur théorique. Bien que le poids du puits de densité soit beaucoup plus faible que le poids du crochet de Poisson (5 ordres de grandeur), sa relative indépendance vis à vis des dérivées spatiales permet de le détecter avec une erreur en norme 1 comparable à celle du crochet de Poisson.

2.7.6.3 Améliorations nécessaires et applications potentielles

Ce test préliminaire indique que la forme du bruit a un impact décisif sur les résultats de l'analyse. Des pré-traitements simples tels que des filtres passe-bas dans l'espace et le temps permettront de diminuer les parasites à petite échelle pour améliorer le calcul des dérivées. De façon plus générale, l'ensemble des outils de traitement d'image et d'analyse statistique sont des outils utilisables pour réduire efficacement les défauts des dispositifs de mesure.

A l'opposé de la réduction de bruit, le choix d'un modèle faiblement dépendant du bruit est une autre solution. Modéliser la dynamique des grandes échelles de temps et d'espace laissera de côté les erreurs aux petites échelles. L'étude de l'organisation de l'état moyen, l'étude statique, s'affranchira naturellement de nombreux types de bruit.

Même si des dispositifs de mesure tels que des caméras sont des sources idéales de par leur résolution spatiale et temporelle grandissante, nous avons vu, section 2.7.4, qu'un petit groupe de mesures fiables permettra aussi une grande précision dans l'analyse PoPe.

Caractérisation du transport turbulent dans le plasma de bord

Sommaire

3.1	Le modèle de bord implémenté dans TOKAM2D	54
3.1.1	Hypothèses définissant le modèle	54
3.1.2	Étude du système linéarisé	55
3.2	Conséquences du chaos sur les outils numériques	59
3.2.1	Mesure du chaos dans le système de Lorenz	59
3.2.2	Mesures du chaos dans TOKAM 2D	61
3.2.3	Fiabilité et caractérisation d'un système chaotique	69
3.3	Compétition entre chaos et transport turbulent	73
3.3.1	Restriction théorique de ν à de faibles valeurs	73
3.3.2	Forte variation du transport turbulent avec la viscosité ν	73
3.3.3	Relation entre maximum de transport, chaos et flux zonaux	76
3.4	Réductions contrôlées du modèle de TOKAM2D	78
3.4.1	Modèle type proie-prédateur : avalanches quasi-périodiques	79
3.4.2	Modèle de diffusion et convection 1D pour les avalanches	84
3.4.3	Réduction par dégradation du maillage de TOKAM2D	90

3.1 Le modèle de bord implémenté dans TOKAM2D

Le code TOKAM2D est un code fluide simulant l'instabilité d'inter-change (instabilité de Rayleigh-Bénard [F.R.S. 1916, Bénard 1901]) présente dans le plasma de bord. Malgré l'ensemble des simplifications qu'il contient, cet outil contient une large gamme de phénomènes observés dans les expériences. Ce modèle a été utilisé dès 1991 [Garbet 1991] pour proposer une explication à la présence de turbulence dans le bord du plasma (SOL : Scrape off Layer). L'ingrédient nouveau est une prise en compte des lignes de champ ouvertes sous la forme d'un puits qui déstabilise les échelles telles que $k\rho_{thi} \simeq k_\theta\rho_{thi} > (L_N/qR)^{1/4} \simeq 0.1$. Ce modèle décrit correctement la turbulence dans la SOL ainsi que les grandeurs caractéristiques de celle-ci. En 1998, l'importance du forçage est mise en évidence [Sarazin 1998] en comparant l'approche du forçage par le flux (conditions de Neumann et utilisation d'une source explicite) et le forçage par le gradient (impossibilité d'évolution du gradient moyen). La plus grande variabilité permise par le premier forçage est explorée par le système qui tend à produire des événements de transport de type avalanche (dynamique retrouvée dans des simulations 3D). La dérivation du modèle est présentée brièvement section 3.1.1 avant d'en développer l'analyse linéaire section 3.1.2 en tant que première caractérisation de la nature du système.

3.1.1 Hypothèses définissant le modèle

Le modèle a été développé afin d'étudier la SOL à l'extrême bord du plasma, constituée de lignes de champ ouvertes qui rentrent en contact avec la paroi du tokamak. La géométrie tri-dimensionnelle (r, θ, ϕ) d'un Tokamak est réduite à un plan bi-dimensionnel $(r, \theta) = (x, y)$ en utilisant l'hypothèse flute. Cette hypothèse stipule que les structures sont quasiment invariantes le long des lignes de champ à cause de l'efficacité du transport dans cette direction. En supposant cette symétrie, on ramène le problème à deux dimensions. La géométrie 2D est encore simplifiée en utilisant une discrétisation slab (on néglige la variation de $x (= r)$ dans $\nabla_x = \partial_x / x$). Les conditions aux bords sont prises périodiques pour utiliser un schéma numérique pseudo-spectral. Dans ce cas on s'attend à ce qu'une région du domaine de simulation soit stable, en pratique dans le choix effectué c'est la région radialement en amont de la source S localisée en x_S : $S(x, y, t) = \exp(-(x - x_S)^2 / L_S^2)$ qui est concernée. Cette zone stable agit alors comme une barrière vis-à-vis du transport sous forme d'avalanche qui ne se propage que très faiblement dans cette région. L'impact de la périodicité en x est diminué au point de ne pas nécessiter une pénalisation artificielle. Enfin, des puits volumiques agissent sur la densité et la vortacité pour modéliser les pertes dans la direction parallèle dues au contact des lignes de champ avec les plaques du divertor du tokamak. Ces derniers termes sont spécifiques à la modélisation du plasma alors que les autres se retrouvent dans la modélisation de l'instabilité de Rayleigh-Bénard.

Les équations portent sur trois inconnues $N(x, y, t)$ (densité), $\phi(x, y, t)$ (potentiel électrique) et $W(x, y, t)$ (vorticité). Le plan (x, y) est considéré comme bi-périodique.

$$\partial_t N + [\phi, N] - D\Delta N = -\sigma N e^{\Lambda-\phi} + S \quad (3.1)$$

$$\partial_t W + [\phi, W] - \nu\Delta W + g\partial_y \log(N) = \sigma(1 - e^{\Lambda-\phi}) \quad (3.2)$$

$$W = \Delta\phi \quad (3.3)$$

Le terme $[g, f]$ est un crochet de Poisson tel que $[g, f] = \partial_x g \partial_y f - \partial_y g \partial_x f$. L'équation (3.1) est un bilan de conservation de la densité d'électrons. L'équation (3.2) est un bilan de conservation de la charge qui se traduit par une équation d'évolution de la vorticité. L'équation (3.3) lie le potentiel électrique à la vorticité qui exprime la divergence du courant de polarisation du plasma. Le temps t est normalisé au temps cyclotronique $\tau = \frac{1}{\Omega_i}$ où $\Omega_i = \frac{eB}{m_i}$ est la fréquence cyclotronique des ions de charge e et de masse m_i . Le potentiel électrique est normalisé à $\frac{T_*}{e}$ où T_* est une énergie thermique. Ces normalisations permettent de déterminer une échelle transverse $\rho_i = \frac{(T_*/m_i)^{1/2}}{\Omega_i}$ avec $(T_*/m_i)^{1/2}$ la vitesse thermique caractéristique dans la direction transverse. Les coefficients de diffusion des particules D , ou de vorticité ν sont normalisés à la diffusion de Bohm définie par $D_B = \frac{T_*}{eB}$. Ces deux diffusions restreintes aux directions transverses au champ magnétique gardent la mémoire de la très forte anisotropie introduite par le champ magnétique entre la direction parallèle, mouvement quasi-libre, et la direction transverse où le mouvement est fortement limité par le champ magnétique. Les valeurs des coefficients de diffusion sont introduites en partie pour stabiliser la résolution numérique qui ne génère quasiment aucune viscosité numérique. Le temps caractéristique de convection dans la direction parallèle τ_{\parallel} introduit le paramètre $\sigma = (\tau_{\parallel}\Omega_i)^{-1} \ll 1$. Le terme $g\partial_y \log(N)$, analogue à la poussée d'Archimède pour Rayleigh-Bénard, tient compte de la courbure du champ magnétique (voir [Sarazin 1998] pour le détail). C'est le seul terme exprimant la géométrie magnétique du système. Le champ magnétique étant supposé constant et homogène pour les autres opérateurs. C'est aussi un terme qui assure le couplage entre W et N , et qui permet ainsi à une instabilité de se développer. Enfin, le système d'équations fait apparaître un potentiel normalisé de référence Λ . Il ne joue aucun rôle dans les crochets de Poisson mais permet de retrouver les expressions usuelles de la physique de la SOL. Pour un choix réaliste de paramètres physiques les crochets de Poisson sont dominants dans les deux équations. Ils permettent le transport des sources vers les puits.

3.1.2 Étude du système linéarisé

Afin de se familiariser avec le système, une étude de sa stabilité linéaire est réalisée. En voici les principales hypothèses et les principales conclusions.

Une séparation d'échelle est faite entre l'équilibre et la perturbation. Pour le champ de densité on définit l'équilibre $\bar{N}(x) = \langle N(x, y, t) \rangle_{y,t}$ et la perturbation associée $\tilde{N}(x, y, t) = N(x, y, t) - \bar{N}(x)$. L'équilibre du champ électrique est supposé donné par une constante, $\bar{\phi} = \Lambda = \langle \phi(x, y, t) \rangle_{x,y,t}$. Les deux perturbations sont considérées "faibles"

par rapport à l'équilibre, $|\bar{N}| \gg |\tilde{N}|$ et $|\Lambda| \gg |\tilde{\Phi}|$. Par ailleurs, la longueur de gradient en x de la densité d'équilibre est considérée constante dans toute la boîte de simulation : $\partial_x \bar{N}(x)/\bar{N}(x) = -\bar{L}_n^{-1}$. La linéarisation du système (eq.(3.1), eq.(3.2), eq.(3.3)) conduit aux équations (eq.(3.4), eq.(3.5))

$$\partial_t \tilde{N} - \bar{n}_x \partial_y \tilde{\phi} - D \partial_{xx} \tilde{N} - D \Delta \tilde{N} = -\sigma \bar{N}(1 - \tilde{\phi}) - \sigma \tilde{n} \quad (3.4)$$

$$\partial_t \tilde{\Delta} \phi - \nu \Delta \Delta \tilde{\phi} + g \frac{\partial_y \tilde{N}}{\bar{N}} = \sigma \tilde{\phi} \quad (3.5)$$

Une solution stationnaire, qui définira l'équilibre \bar{N} existe mais est en contradiction avec l'hypothèse $\partial_x \bar{N}(x)/\bar{N}(x) = \text{cte}$ sur l'ensemble de la boîte :

$$\begin{aligned} \frac{D}{\sigma} \partial_{xx} \bar{N} &= \bar{N} & \text{soit } \lambda &= \sqrt{\frac{D}{\sigma}} \\ \bar{N}(x) &= A e^{\frac{x}{\lambda}} + B e^{-\frac{x}{\lambda}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Pour déterminer les constantes A et B , il suffit d'imposer deux contraintes, un point de rebroussement au centre de la boîte de simulation : $\partial_x \bar{N}(x)|_{x=L_x/2} = 0$, et un flux de particules sur le bord de la boîte de simulation : $F(x=0) = -D \partial_x \bar{N}(x=0) = F_0$. Ces deux hypothèses sont en contradiction avec l'hypothèse de dérivée et longueur de gradient constantes de $\bar{N}(x)$ dans la boîte, néanmoins les taux de croissances obtenus analytiquement et numériquement sont en accord. La longueur de gradient constante peut être déduite de la forme exponentielle de la solution en se restreignant aux domaines où $|x| \gg 0$, loin du point de rebroussement.

$$\left. \begin{aligned} \partial_x \bar{N}(x)|_{x=L_x/2} &= 0 \\ F(0) &= F_0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \bar{N}(x) = \frac{F_0 \lambda}{D} \cosh\left(\frac{L_x/2 - x}{\lambda}\right) \quad (3.7)$$

L'équation de la partie perturbative de la densité s'écrit alors :

$$\partial_t \tilde{N} - \bar{n}_x \partial_y \tilde{\phi} - D \Delta \tilde{N} = \sigma \bar{N} \tilde{\phi} - \sigma \tilde{N} \quad (3.8)$$

Ce système peut être réécrit sous forme matricielle $\mathbb{L} \begin{pmatrix} \tilde{N} \\ \tilde{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} \partial_t - D \Delta + \sigma & -\bar{n}_x \partial_y - \sigma \bar{N} \\ \frac{g}{\bar{N}} \partial_y & \partial_t \Delta - \nu \Delta \Delta - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{N} \\ \tilde{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Système que l'on utilisera dans l'espace de Fourier en réécrivant \tilde{N} , $\tilde{\phi}$ et 3.9 tels que :

$$\begin{pmatrix} \tilde{N} \\ \tilde{\phi} \end{pmatrix} = \sum_{k_x, k_y} \begin{pmatrix} \hat{\tilde{N}}_{k_x, k_y} \\ \hat{\tilde{\phi}}_{k_x, k_y} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-i\omega t} \quad (3.10)$$

$$\begin{pmatrix} -i\omega + Dk^2 + \sigma & -ik_y\bar{n}_x - \sigma\bar{N} \\ i\frac{g}{N}k_y & i\omega k^2 - \nu k^4 - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{N} \\ \hat{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

où $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. La recherche de solutions non triviales nous amène à étudier les conditions qui entraînent $\det(\hat{\mathbb{L}}) = 0$, c'est-à-dire l'équation du second degré en ω obtenue à partir du polynôme caractéristique.

$$\det(\hat{\mathbb{L}}) = k^2(-i\omega + Dk^2 + \sigma)(i\omega - \nu k^2 - \frac{\sigma}{k^2}) + igk_y\sigma + gk_y^2/\bar{L}_n \quad (3.12)$$

En fait on s'intéresse au signe de la partie imaginaire de ω car de manière générale la solution est de la forme $\omega = \omega_r + i\gamma$. Les deux limites analytiques $\lim k \rightarrow \infty$ et $\lim k \rightarrow 0$ montrent que les structures de très petites tailles sont stables (ceci réduit les contraintes sur la résolution du maillage pour les simulations numériques) et que les structures de très grandes tailles, à l'exception des structures allongées en x ($k_x = 0$), sont aussi stables. Pour déterminer la nature des perturbations de taille intermédiaire, il est nécessaire d'étudier l'expression exacte du coefficient d'amortissement. L'équation du second ordre à résoudre peut s'écrire :

$$\omega^2 + 2B\omega + C = 0 \quad (3.13)$$

$$B = \frac{i}{2}(k^2(D + \nu) + \frac{\sigma}{k^2} + \sigma) \quad (3.14)$$

$$C = -\sigma D - k^4\nu D - \frac{\sigma^2}{k^2} - k^2\nu\sigma + \frac{gk_y^2}{\bar{L}_n k^2} + ig\sigma\frac{k_y}{k^2} \quad (3.15)$$

Ainsi les expressions de ω et γ (le taux de croissance) sont :

$$\begin{aligned} \omega &= -B \pm (B^2 - C)^{1/2} \\ \gamma &= -\text{Im}(B) \pm \text{Im}((B^2 - C)^{1/2}) \end{aligned}$$

Un taux de croissance est associé à chacune des deux solutions ω . Pour l'analyse de stabilité, nous retenons toujours le taux de croissance le plus instable des deux. L'étude des courbes de γ (Fig.(3.2)) montre bien une gamme de vecteurs d'ondes dont le taux d'accroissement est positif. Les cas les plus instables sont pour $k_x = 0$. Enfin, on retrouve les comportements asymptotiques énoncés précédemment pour les petites structures et les grandes structures.

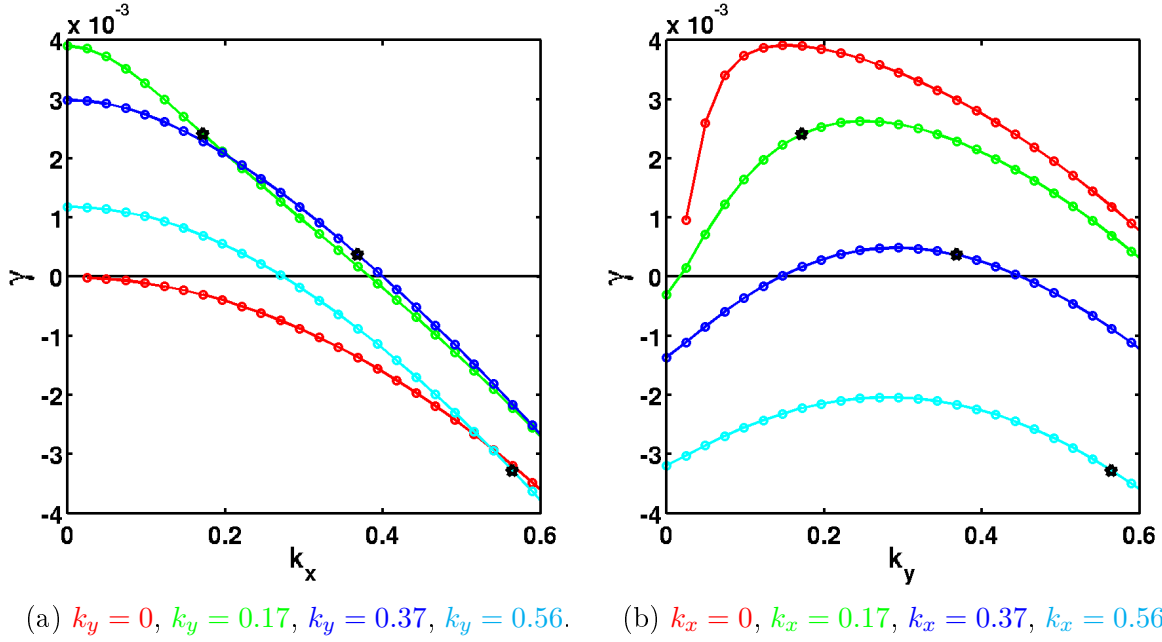


FIGURE 3.1 – Taux de croissance en fonction du nombre d'onde dans la direction x à gauche (y à droite). Les étoiles représentent des modes communs aux deux graphiques. ($D = \nu = 10^{-2}$, $g \simeq 5.72 \times 10^{-4}$, $\sigma \simeq 1.14 \times 10^{-5}$, $-\bar{L}_n^{-1} = -\sqrt{D/\sigma}^{-1} \simeq -0.034$)

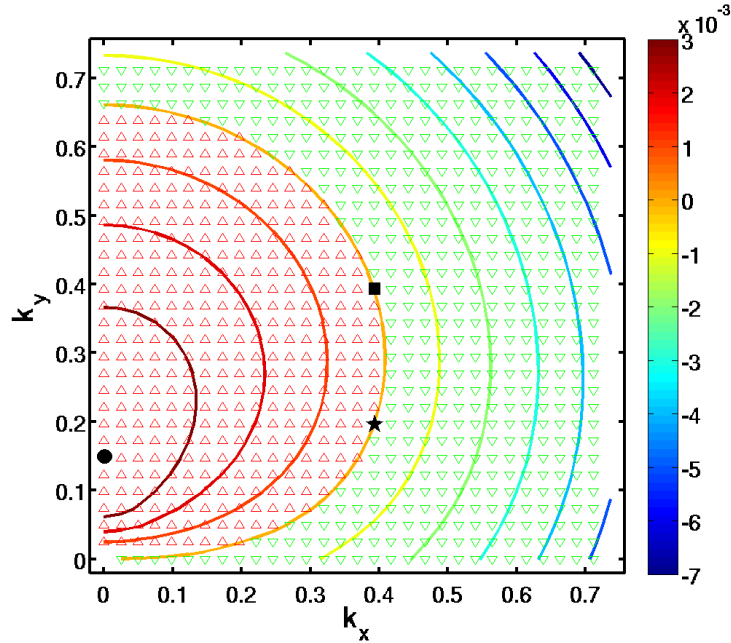


FIGURE 3.2 – Taux de croissance en fonction du nombre d'onde pour $N_x = N_y = 30$. Le cercle noir représente le mode le plus instable $\gamma_{n_x, n_y} = \gamma_{0,6} = 3,91 \times 10^{-3} \gg 0$, l'étoile noire représente le mode le moins instable $\gamma_{16,8} = 1,48 \times 10^{-6} > 0$ et le carré noir représente le mode le moins évanescent $\gamma_{16,16} = -2,75 \times 10^{-6} < 0$. Les triangles verts sont les modes stables (' ∇ '), les triangles rouges sont les modes instables (' \triangle '). ($D = \nu = 10^{-2}$, $g \simeq 5.72 \times 10^{-4}$, $\sigma \simeq 1.14 \times 10^{-5}$, $-\bar{L}_n^{-1} = -1/\sqrt{D/\sigma} \simeq -0.034$)

3.2 Conséquences du chaos sur les outils numériques

3.2.1 Mesure du chaos dans le système de Lorenz

Le chaos est défini par une sensibilité exponentielle vis-à-vis des conditions initiales d'un système d'évolution déterministe. En pratique, cela se traduit par l'impossibilité de prédire l'état d'un système sur des temps longs, quelle que soit la méthode numérique employée. La vitesse avec laquelle la perturbation initiale croît permet de définir une mesure du chaos, l'exposant de Lyapunov λ . Soit i une grandeur d'intérêt, soit $\tilde{i} = i + \iota$ la même grandeur perturbée par ι , l'exposant de Lyapunov λ est défini par :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\|\tilde{i}(0) - i(0)\| \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\tilde{i}(t) - i(t)\|}{\|\tilde{i}(0) - i(0)\|} = \lambda \quad (3.16)$$

Ce qui est équivalent à dire que la perturbation tend à croître de façon exponentielle en moyenne sur la trajectoire (limite $t \rightarrow \infty$ et $\iota(0) \rightarrow 0$)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\|\iota(0)\| \rightarrow 0} \|\iota(t)\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\|\iota(0)\| \rightarrow 0} \|\iota(0)\| e^{\lambda t} \quad (3.17)$$

Ainsi, toute perturbation initiale finie $\iota(0) = \iota_0$ deviendra arbitrairement grande par rapport à i au bout d'un temps t fini. A la définition mathématique eq.(3.17) il convient de déterminer une expression physique. Une approximation du coefficient de Lyapunov est donc mesurée pour les systèmes simulés. A titre d'exemple introductif considérons le système de Lorenz suivant :

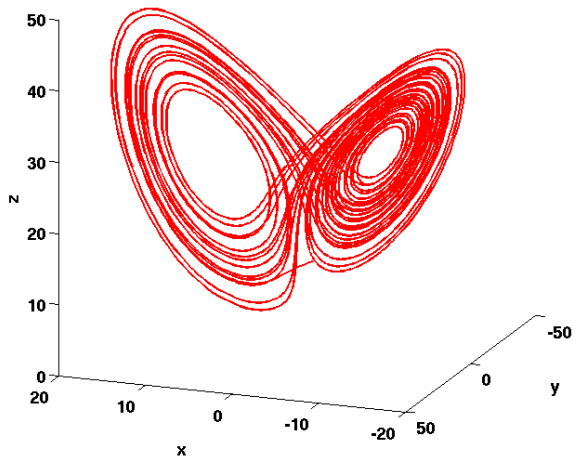
$$\frac{dx(t)}{dt} = -\sigma x(t) + \sigma y(t) \quad (3.18)$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = -y(t) + x(t)(\rho - z(t)) \quad (3.19)$$

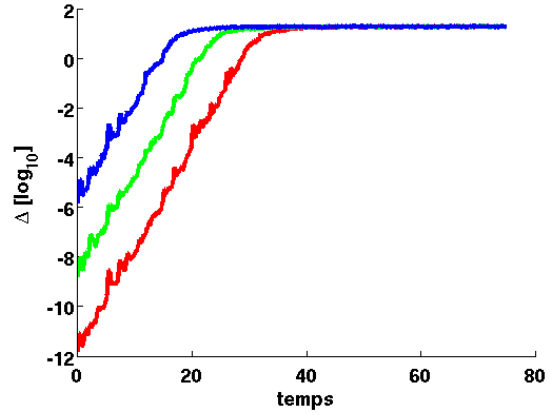
$$\frac{dz(t)}{dt} = -\beta z(t) + x(t)y(t) \quad (3.20)$$

Ce système est une réduction d'un modèle de thermoconvection comparable au modèle de TOKAM2D. Les propriétés chaotiques sont observées pour les valeurs standard des paramètres $(\sigma, \rho, \beta) = (10, 28, 8/3)$. Sur la figure 3.3a une trajectoire $(x(t), y(t), z(t))$ est représentée en 3 dimensions. Le célèbre attracteur de Lorenz en forme de papillon est discernable. Toutes les trajectoires semblent restreintes à cet attracteur. En particulier le passage d'une aile à l'autre est imprédictible [Lorenz 1963].

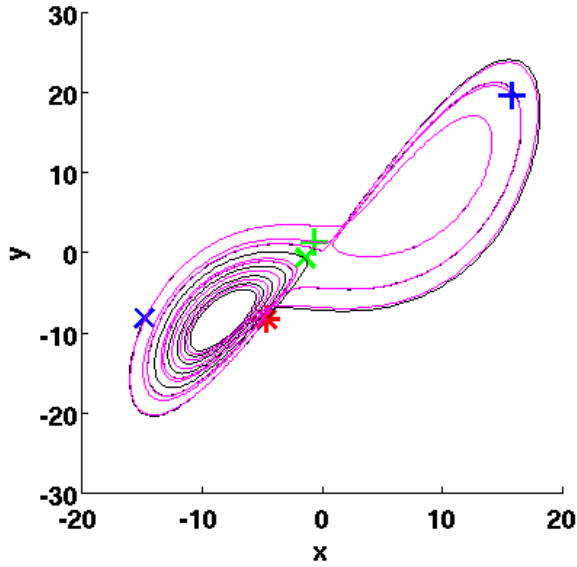
Sur la figure 3.3b, la mesure $\Delta(t) = 1/N_c \sum_{i=1}^{N_c} \|X_i(t) - \tilde{X}_i(t)\|$ calculée à partir de $N_c = 250$ couples de conditions initiales initialement proches mais réparties dans tout l'espace est présentée pour trois amplitudes initiales de la perturbation $\Delta(t=0) = 10^{-6}, 10^{-9}, 10^{-12}$. Une perturbation initiale $\Delta(t=0) = 10^{-18}$ n'est pas réalisable à cause de la précision relative finie des nombres à virgules flottantes. Les trois groupes possèdent une phase d'exponentiation (accroissement linéaire en échelle logarithmique) d'autant plus longue que l'amplitude initiale est faible. Cette croissance est stoppée lorsque la



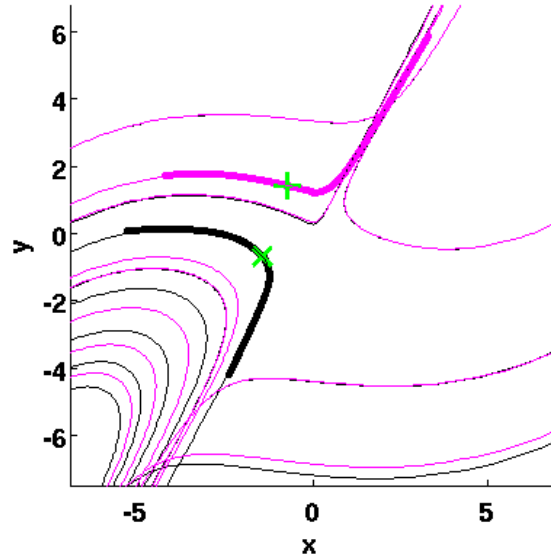
(a) Illustration de l'attracteur de Lorenz pour les paramètres $(\sigma, \rho, \beta) = (10, 28, 8/3)$.



(b) Pour trois perturbation initiales ($\simeq 10^{-12}$, $\simeq 10^{-8}$ et $\simeq 10^{-6}$), mesure de la distance entre 250 couples de trajectoires.
 $\Delta(t) = 1/250 \sum_{i=1}^{250} \|X_i(t) - \tilde{X}_i(t)\| \quad [\log_{10}]$.



(c) Deux trajectoires voisines.



(d) Zoom sur la séparation.

FIGURE 3.3 – Illustrations du système de Lorenz Fig. 3.3c et Fig. 3.3d de deux trajectoires initialement proches ($\Delta(t=0) \simeq 10^{-6}$) et de trois points d'intérêt : courbe noire et marqueurs 'x', courbe magenta et marqueur '+'. Les marqueurs rouges sont confondus ($\Delta(t=12) \simeq 10^{-2}$), les verts se séparent ($\Delta(t=19.71) \simeq 1$), les bleus sont séparés, un sur chaque aile de l'attracteur ($\Delta(t=20.25) \simeq 10$).

perturbation atteint une amplitude comparable à la taille de l'attracteur. Le taux d'exponentiation est comparable pour l'ensemble des couples de conditions initiales étudiés. La phase de raccord entre l'exponentiation et la saturation sera étudiée dans le cas de TOKAM2D. Sur la figure 3.3c deux trajectoires issues de conditions initiales proches ($\Delta(t=0) \simeq 10^{-6}$) sont représentées (l'une en noir, l'autre en magenta) ainsi que trois temps spécifiques pendant leur phase d'exponentiation sur chaque courbe ('x' pour les

points sur la trajectoire noire et '+' pour les points sur la trajectoire magenta). Les marqueurs rouges sont quasiment confondus pour $t = 12$, $\Delta(t = 12) \simeq 10^{-2}$. Les marqueurs verts sont visiblement distincts pour $t = 19.71$, $\Delta(t = 19.71) \simeq 1$ (voir le zoom Fig. 3.3d). Les marqueurs bleus sont séparés de manière macroscopique, un sur chaque aile de l'attracteur, pour $t = 20.25$, $\Delta(t = 20.25) \simeq 10$. A partir de $t = 20.25$ aucune corrélation entre les deux trajectoires ne peut être établie.

3.2.2 Mesures du chaos dans TOKAM 2D

Le paramètre ν de l'équation de voriticité (eq.(3.2)) permet un contrôle direct du niveau de turbulence. Cette propriété est utilisée pour comparer trois différentes approches de mesure du chaos dans des simulations : le suivi de particules passives, l'étude directe du potentiel électrique et la mesure de la divergence de deux simulations initialement proches.

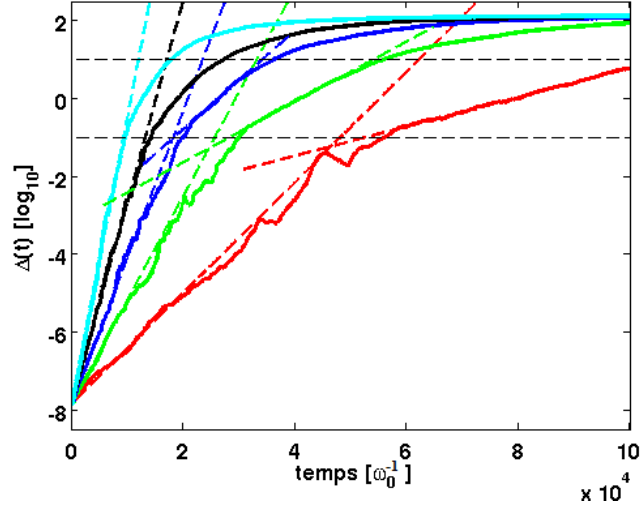
3.2.2.1 Mesure lagrangienne : traceurs passifs

La première approche de suivi de particules passives est "lagrangienne". En faisant l'hypothèse qu'une particule du plasma n'est pas assez influente pour modifier la dynamique du système, les traceurs passifs sont équivalents à des particules du plasma qui se déplaceraient dans un régime de dérive électrique. Les effets collectifs de diffusion ainsi que l'impact de la source et du puits sont négligés dans les équations du mouvement qui ne dépend alors plus que du potentiel. Soit $(x(t), y(t))$ la position d'une particule à l'instant t , son mouvement est défini par les équations Hamiltoniennes.

$$\begin{pmatrix} \partial_t x(t) \\ \partial_t y(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_y \phi(x, y, t) \\ \partial_x \phi(x, y, t) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

où ϕ , le potentiel électrostatique, est l'Hamiltonien et x, y les variables conjuguées. En mesurant l'évolution au cours du temps de la distance moyenne entre des particules initialement proches, il est possible de retrouver une signature chaotique. L'analyse des traces temporelles de ces divergences indique l'existence de trois régimes : deux régimes chaotiques à petite échelle et un régime de marche aléatoire (brownien) à grande échelle (voir Fig. 3.4 et Fig. 3.5). Deux régimes de croissance exponentielle sont observés, le premier (λ_1) pour les distances Δ inférieures à $10^{-1} [\rho]$, le second (λ_2) pour les distances $\Delta < 10^1 [\rho]$. Dans les deux régimes, le taux d'exponentiation des trajectoires dépend de ν (voir tableau tab. 3.1). Les projections de Δ sur x ($= \Delta_x$) et y ($= \Delta_y$) montrent des comportements tout à fait similaires à ces petites échelles. L'intervalle $[0.1, 10]$ correspond à la taille des structures et/ou à l'échelle de variation des structures de densité, potentiel et vortacité. Lorsque deux particules sont éloignées d'une distance inférieure à la taille d'une structure caractéristique, elles peuvent se trouver dans un unique point X et ainsi être sujette à la situation la plus chaotique possible. Lorsque les particules sont séparées d'une distance supérieure, la probabilité que les deux particules d'un couple soient soumises à un unique point X ou deux points X opérant en synergie diminue, l'exposant de lyapunov moyenné sur un ensemble de couples diminue.

FIGURE 3.4 – Accroissement de la distance entre $N_p = 2000$ paires de traceurs passifs advectés par le potentiel électrique de simulations TOKAM 2D. $\nu = 4.0 \times 10^{-2}$, $\nu = 1.0 \times 10^{-2}$, $\nu = 2.5 \times 10^{-3}$, $\nu = 6.25 \times 10^{-4}$, $\nu = 1.5625 \times 10^{-4}$. Mise en évidence de deux régimes d'exponentiation λ_1 pour $\Delta \lesssim 10^{-1}$ et λ_2 pour $\Delta \lesssim 10$ par des droites en échelle logarithmiques.

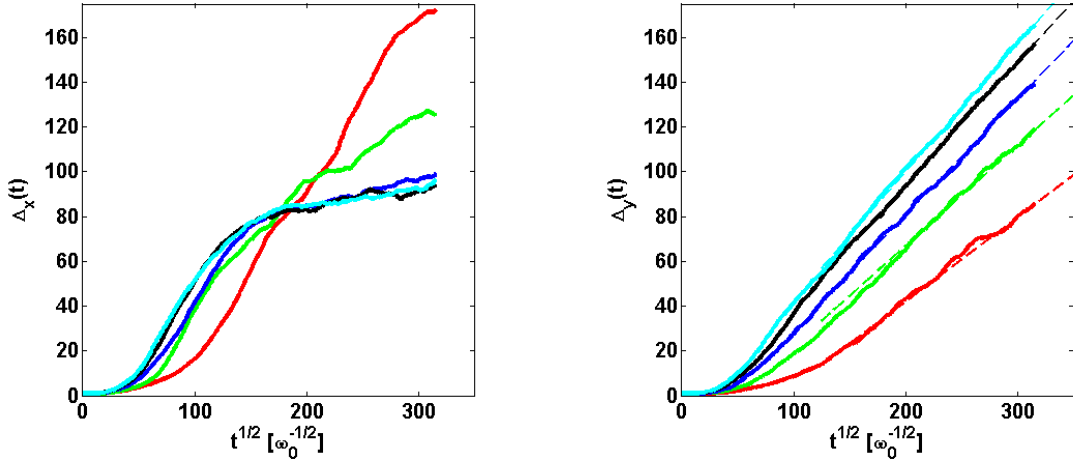


Le troisième régime est différent pour la dimension x et la dimension y . La barrière de transport localisée en x et indépendante de y (région stable due à la périodicité, à la localisation de la source et à la nature de l'instabilité) empêche l'établissement de trajectoires qui explorent la périodicité dans la dimension x . La distance entre deux particules (Fig. 3.5a : $\Delta_x(t)$) et la distance par rapport à l'origine (Fig. 3.5c : $\delta_x(t)$) convergent vers une valeur de l'ordre de $L_x/2$. Le même effet est observé dans le système de Lorenz car l'attracteur semble confiné dans une petite région de l'espace donc la perturbation initiale ne peut grandir indéfiniment. Cependant, pour de fortes valeurs de ν , certains blobs arrivent à traverser la barrière de transport et emmènent avec eux des particules passives, ce qui augmente la distance entre certains couples de particules, au point d'impacter la moyenne. Le transport dans la dimension x engendre des effets de groupe lorsque ν augmente : la distance moyenne entre deux particules initialement proches est plus faible pour les ν élevés (Fig. 3.5a) alors que la distance parcourue depuis la position initiale est plus grande (Fig. 3.5c). Cet effet s'explique par la taille des structures qui croît significativement, ainsi les couples de particules ont une plus grande probabilité de partager une même structures et moins de chance d'en changer car pour un domaine de simulation de taille constante, il existe un nombre inférieure de structures. L'élongation des structures dans la direction x (voir Fig. 3.14) augmente l'efficacité du transport et donc la distance parcourue par chaque traceur par rapport à sa position initiale. La direction y est librement explorée, les figures Fig. 3.5b et 3.5d mettent en évidence un régime de marche aléatoire telle que $\Delta_y \propto t^{1/2}$ et $\delta_y \propto t^{1/2}$. Les pentes en trait discontinu sont reportées tableau tab. 3.1.

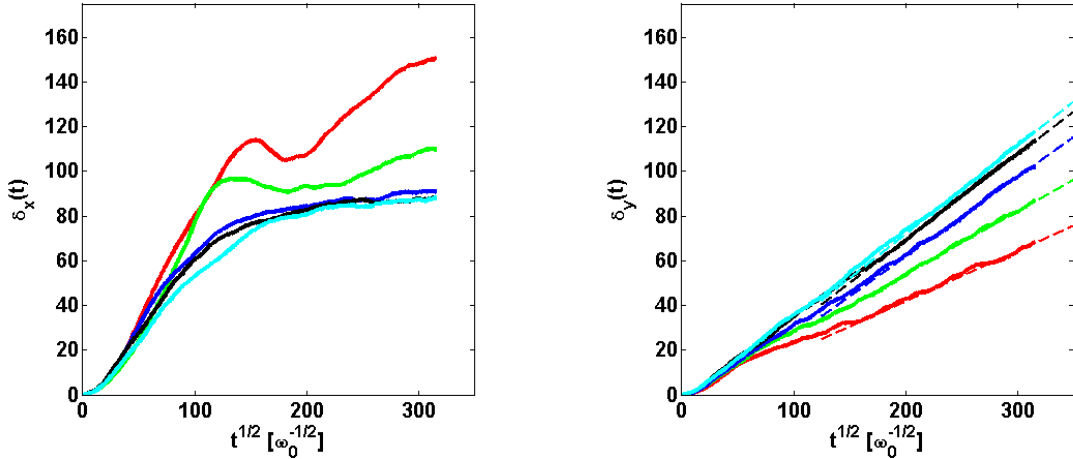
Le premier critère de mesure du chaos associe une valeur $\lambda_{i,j}(t)$ qui varie au cours du temps à mesure que chaque paire de traceurs passifs (i, j) parcourt l'attracteur. Les traceurs se déplaçant dans l'espace (x, y, t) , des dépendances supplémentaires peuvent être introduites pour décrire l'exponentiation, comme la détection des bassins d'attractions à l'aide de grandeurs telles que "le squelette de la turbulence" [Mathur 2007].

ν	4×10^{-2}	1×10^{-2}	2.5×10^{-3}	6.25×10^{-4}	1.5625×10^{-4}
λ_1	3.26×10^{-4}	6.14×10^{-4}	8.66×10^{-4}	11.9×10^{-4}	16.8×10^{-4}
λ_2	0.864×10^{-4}	1.78×10^{-4}	2.91×10^{-4}		
D_y	37.6×10^{-2}	44.8×10^{-2}	51.8×10^{-2}	54.6×10^{-2}	57.0×10^{-2}
d_y	22.3×10^{-2}	28.2×10^{-2}	35.6×10^{-2}	38.3×10^{-2}	39.5×10^{-2}

TABLE 3.1 – Tableau reportant les grandeurs caractérisant les différents régimes de séparation entre deux particules : λ_1 exposant du premier régime chaotique pour $\Delta(t) < 10^{-1}$, λ_2 exposant du second régime chaotique pour $10^{-1} < \Delta(t) < 10^1$, D_y coefficient de diffusion de la marche aléatoire en y entre 2 particules et d_y coefficient de diffusion de la marche aléatoire en y entre une particule et son origine.



(a) Distance moyenne en x entre 2 particules. (b) Distance moyenne en y entre 2 particules.



(c) Distance en x par rapport à l'origine. (d) Distance en y par rapport à l'origine.

FIGURE 3.5 – Mesures de distances en utilisant $N_p = 2000$ paires de traceurs passifs advectés par le potentiel électrique de simulations TOKAM 2D. $\nu = 4.0e^{-2}$, $\nu = 1.0e^{-2}$, $\nu = 2.5e^{-3}$, $\nu = 6.25e^{-4}$, $\nu = 1.5625e^{-4}$. Fig. 3.5b et 3.5d, mise en évidence d'un régime de marche aléatoire telle que $\Delta_y \propto t^{1/2}$ et $\delta_y \propto t^{1/2}$.

3.2.2.2 Mesure eulérienne : coefficient d'exponentiation locale

La seconde méthode de mesure du chaos ne passe pas par l'intermédiaire de particules passives mais sonde directement le potentiel électrique. Connaissant la dynamique des particules grâce à l'équation (3.21), on peut directement calculer la stabilité d'une trajectoire en un point donné en étudiant la matrice tangente du champ de vitesse. La matrice tangente d'une application, aussi appelée matrice des déformations en mécanique, est la matrice jacobienne d'un champ d'advection. Dans notre cas, le champ de vitesse étant défini par le potentiel, la matrice tangente sera directement la hessienne (matrice carré des dérivées partielles secondes) du potentiel électrique :

$$H_\phi(x, y, t) = \begin{pmatrix} -\partial_{xy}\phi(x, y, t) & -\partial_{yy}\phi(x, y, t) \\ \partial_{xx}\phi(x, y, t) & \partial_{yx}\phi(x, y, t) \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Cette hessienne peut aussi être obtenue en linéarisant le système eq.(3.21) pour obtenir l'évolution d'une perturbation $d(x, y, t) = (d_x(x, y, t), d_y(x, y, t))$ au cours du temps.

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dt}d_x(x, y, t) \\ \frac{d}{dt}d_y(x, y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_{xy}\phi(x, y, t) & -\partial_{yy}\phi(x, y, t) \\ \partial_{xx}\phi(x, y, t) & \partial_{yx}\phi(x, y, t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x(x, y, t) \\ d_y(x, y, t) \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

Le système (3.23) permet d'interpréter les valeurs propres λ_\pm de la hessienne du potentiel.

$$\lambda_\pm(x, y, t) = \pm \left((\partial_{xy}\phi(x, y, t))^2 - \partial_{yy}\phi(x, y, t)\partial_{xx}\phi(x, y, t) \right)^{-1/2} \quad (3.24)$$

Les deux valeurs propres sont de signes opposés car le volume de l'espace des phases est conservé : $\sum_i \lambda_i = 0$, donc en deux dimensions $\lambda_1 + \lambda_2 = 0$. Selon leur nature, réelle ou complexe, ces valeurs propres indiqueront l'expansion / contraction ou l'éventuel changement d'orientation de la distance élémentaire $d(x, y, t)$. La valeur $\lambda(x, y, t)^2$ possède une interprétation physique qui illustre le comportement local du système avec une analogie mécanique. Le gradient des déformations (eq 3.22) peut être décomposé en une composante symétrique (la matrice symétrique de déformation σ) et une antisymétrique (la matrice antisymétrique de rotation ω).

$$\begin{aligned} \sigma(x, y, t) &= H_\phi(x, y, t) + H_\phi^t(x, y, t) \\ \omega(x, y, t) &= H_\phi(x, y, t) - H_\phi^t(x, y, t) \end{aligned}$$

Si $\lambda^2 > 0$, alors le champ de vitesse est localement hyperbolique et les déformations l'emportent sur les rotations. Si $\lambda^2 < 0$, alors la topologie des trajectoires est localement elliptique. Sur la figure 3.6a on s'intéresse aux avalanches localisées en $(x, y) \simeq (100, 50)$ (marquées d'une étoile) et $(x, y) \simeq (150, 25)$. Les deux avalanches sont localisées avec deux structures étendues dans la direction x visibles sur le potentiel (voir Fig. 3.6b). Le champ d'advection lié à de telles structures est une forte advection dans la direction x . La figure 3.6b montre des structures en point X qui sont des structures hypothétiques génératrices du chaos. Elles indiquent une forte interaction entre le champ électrique généré par l'avalanche et le champ électrique fossile qui dévie la trajectoire de l'avalanche.

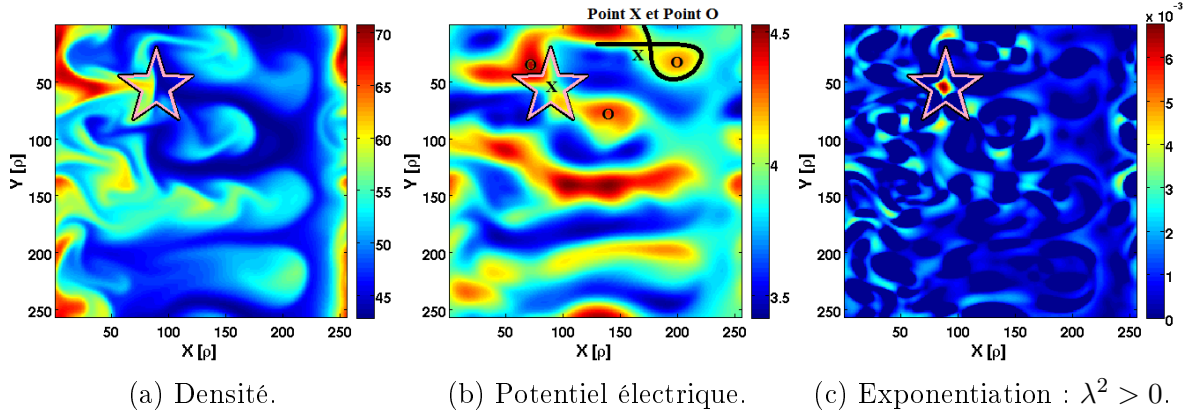


FIGURE 3.6 – Densité, potentiel et champ d'exponentiation d'une simulation TOKAM2D standard. L'étoile marque une région de Lyapunov élevé (point X) sur les trois champs

La figure 3.7 explicite la dépendance radiale du coefficient d'exponentiation locale en fonction de ν (voir Fig. 3.10 pour le code des couleurs). Les profils sont la moyenne en t et y en ne sélectionnant que les valeurs $\lambda^2 > 0$ car $\langle \lambda^2 \rangle_{x,y} = \langle (\partial_{xy}\phi)^2 - \partial_x^2\phi\partial_y^2\phi \rangle_{x,y} \equiv 0$. Une fois de plus, la dépendance en ν est claire : plus ν est faible, plus le système est chaotique. Pour les systèmes les plus chaotiques, le maximum de chaos est atteint à côté de la source, là où naît le transport turbulent. Entre 200 ρ et 250 ρ le chaos diminue fortement dans une zone correspondant à la localisation d'une barrière de transport due à la périodicité : l'instabilité qui déclenche le transport turbulent n'est pas active dans cette région où le gradient de densité change de signe. Entre ces deux régions, le degré de chaos diminue avec l'intensité du transport turbulent : le transport n'étant pas constant en x à cause de l'existence de puits volumiques qui redirigent ce transport dans la direction parallèle.

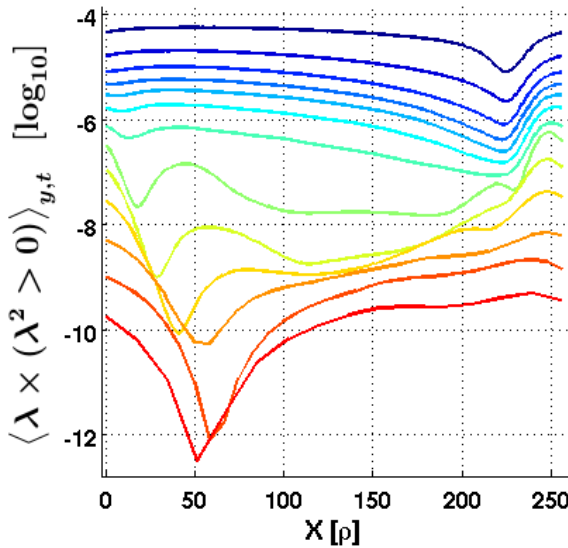


FIGURE 3.7 – Profils radiaux de la moyenne en t et y conditionnée ($\lambda^2 > 0$ seulement) des coefficients d'exponentiation pour différents ν , allant de $\nu \simeq 10^{-5}$ (bleu foncé) à $\nu \simeq 10^2$ (rouge). Voir Fig. 3.10 pour le code précis des couleurs.

3.2.2.3 Mesure globale : distance entre deux simulations

Cette troisième approche est l'application directe de la définition eq.(3.16) sur les champs de densité et de potentiel : une simulation en régime turbulent est répétée à partir d'un temps donné en perturbant le potentiel électrique. On crée alors deux conditions initiales voisines et on peut alors suivre la dynamique de deux simulations voisines. Deux conditions initiales sont représentées Fig. 3.8a et Fig. 3.8c. La perturbation qui les sépare est un bruit blanc d'amplitude 10^{-9} illustré Fig. 3.8b.

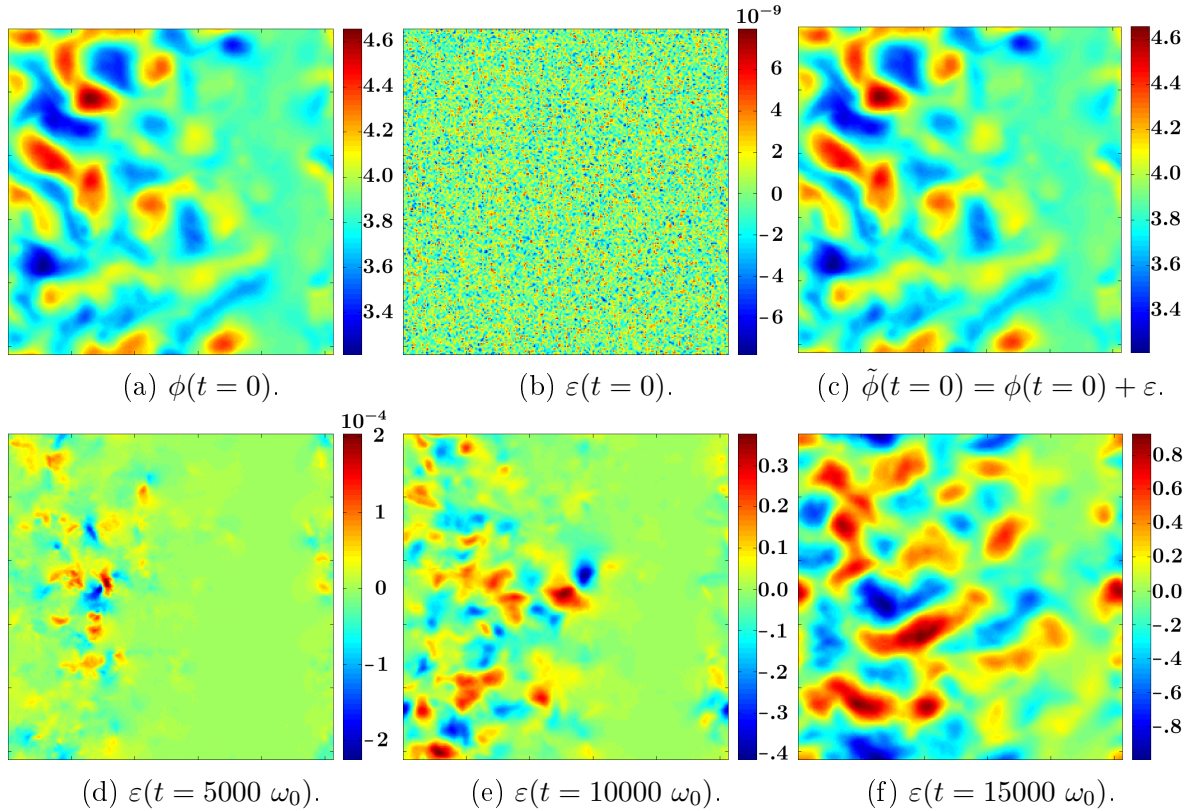


FIGURE 3.8 – Divergence de 2 simulations initialement proches. Fig. 3.8a et Fig. 3.8c : conditions initiales. Fig. 3.8d-3.8f : évolution de la perturbation. Simulation standard (type S1), $\nu = 1.5625^{-4}$.

Les figures 3.8d, 3.8e et 3.8f représentent l'évolution au cours du temps ($t = 5000, t = 10000, t = 15000$) de la différence entre les deux simulations. Cette mesure de la distance entre les simulations augmente rapidement, l'ordre de grandeur de $\delta\phi = \tilde{\phi} - \phi$ des 3 premiers instants représentés est de $\|\delta\phi\| \sim 10^{-9}$ à $t = 0 \omega_0^{-1}$, $\|\delta\phi\| \sim 10^{-4}$ à $t = 5000 \omega_0^{-1}$ et $\|\delta\phi\| \sim 0.7$ à $t = 10000 \omega_0^{-1}$. La perturbation au temps $t = 15000 \omega_0^{-1}$ n'a pas augmenté de façon exponentielle par rapport à l'instant $t = 10000 \omega_0^{-1}$ mais la forme de $\delta\phi$ ressemble à celle d'une possible réalisation du potentiel. La divergence est aussi mesurable sur le champ de densité N même si la perturbation est initialement sur le potentiel électrique ϕ car les deux champs sont fortement couplés : dès la première itération temporelle une perturbation est détectable sur le champ de densité.

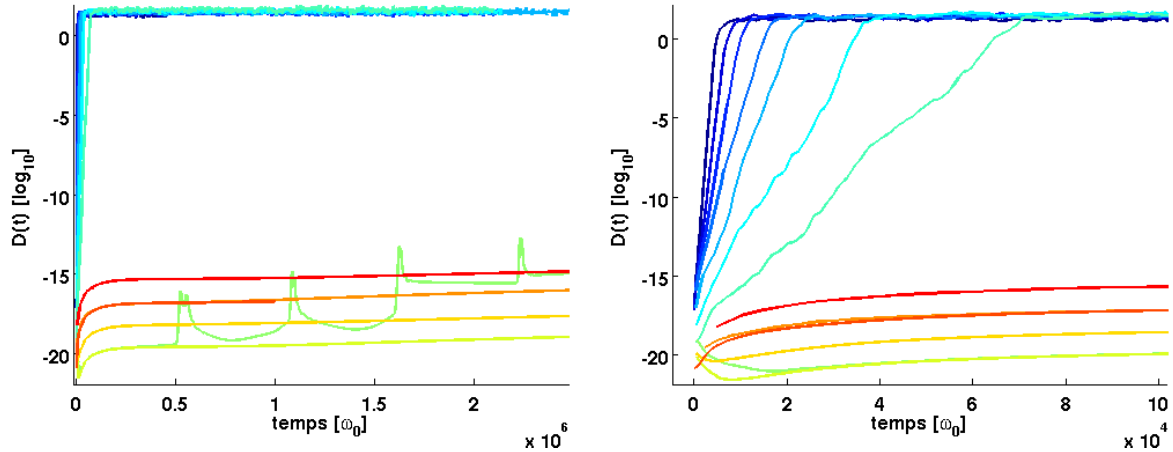
Soit la distance $D_X(t)$ mesurant, sur la variable X , l'écart entre deux simulations :

$$D_X(t) = \langle |X(x, y, t) - \tilde{X}(x, y, t)| \rangle_{x,y} \quad (3.25)$$

La mesure de l'exposant de Lyapunov global $\lambda_X(t)$ est alors définie par :

$$\lambda_X(t) = \log(D_X(t))/t \quad (3.26)$$

Les figures 3.9a et 3.9b illustrent la séparation exponentielle de deux simulations initialement proches. Une large gamme de ν dans l'intervalle $[10^{-5}, 10^2]$ est représentée (voir Fig. 3.10 pour le code des couleurs). Une des simulations ($\nu = 16 \times 10^{-2}$, courbe verte ponctuée de pics figure 3.9a) a un comportement quasi-périodique qui oscille entre un régime stable et un régime d'apparence chaotique sur un temps très court. Cette simulation semble partager la plage de ν étudiée entre systèmes chaotiques et systèmes non chaotiques. Un effet de taille de boîte apparaît à mesure que ν augmente et que la taille des structures augmente (voir Fig. 3.14).



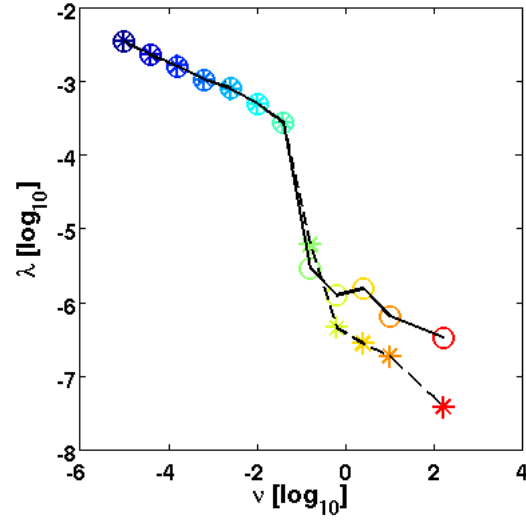
(a) $D_\phi(t)$ pour différents ν sur un temps long. (b) $D_\phi(t)$ pour différents ν sur un temps court.

FIGURE 3.9 – Distance $D_\phi(t)$ (eq.(3.25)) mesurée entre deux simulations initialement proches ($\simeq 10^{-16}$). Simulations standards (Type S1) pour $\nu \in [10^{-5}, 10^2]$ (code couleur présent Fig. 3.10). Plus ν diminue, plus le système est chaotique.

Courbe verte en dents de scie, voir section 3.4.1.

La figure 3.10 montre que les deux mesures (basées sur la densité ou le potentiel) sont en accord quantitatif sur la valeur du Lyapunov ($\lambda_N(t) \simeq \lambda_\phi(t)$). Une forte baisse du niveau de chaos apparaît pour $\nu \simeq 10^{-1}$, lorsque les structures de potentiel et densité deviennent comparables à la taille de la boîte et que par conséquent, leur nombre diminue. Cette diminution du nombre de degrés de liberté est avancée comme la principale raison de la diminution du Lyapunov.

FIGURE 3.10 – Mesure du Lyapunov global de simulations standards (type S1) de TOKAM2D dont le ν varie. Les cercles 'o' sont des mesures effectuée sur les champs de densité, les étoiles '*' sur les champs de potentiel. Un écart de deux ordres de grandeur est présent entre $\nu = 4 \times 10^{-2}$ et $\nu = 16 \times 10^{-2}$.

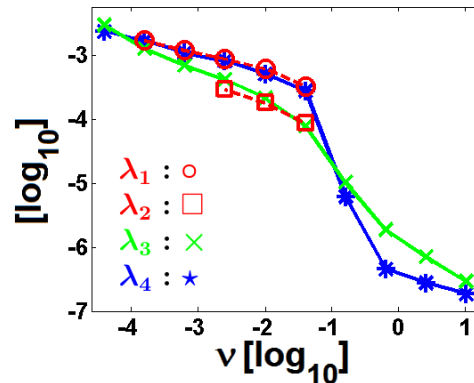


3.2.2.4 Équivalence des 3 mesures du chaos

Les trois mesures du degré de chaos évaluées sur une large plage de ν montrent les mêmes conclusions bien que chaque mesure possède certaines spécificités : lorsque ν diminue, le degré de chaos augmente et il existe un saut dans cette progression autour de $\nu \simeq 10^{-1}$.

- La mesure Lagrangienne utilisant des traceurs passifs a mis en évidence l'existence de deux régimes chaotiques à deux échelles : λ_1 aux petites échelles, pour $\Delta < 10^{-1}$, et λ_2 aux échelles intermédiaires, pour $10^{-1} < \Delta < 10$ (voir section 3.2.2.1).
- La mesure Eulérienne issue du potentiel électrique permet une mesure instantanée du degré de chaos, sans passer par l'utilisation de traceurs passifs et l'étude de trajectoires au cours du temps. Cette seconde mesure a permis de mettre en évidence la répartition du chaos dans l'espace. Pour cette comparaison, nous retenons λ_3 l'intégrale des profils présentés sur la figure Fig. 3.7 (voir section 3.1.2).
- La mesure globale basée sur la divergence de deux simulations, nommée λ_4 , est la mesure la plus proche de la définition du chaos donnée eq.(3.16) mais elle nécessite de répéter des simulations entières, ce qui peut être coûteux (voir section 3.2.2.3).

FIGURE 3.11 – Comparaison des trois mesures du degrés de chaos utilisées pour étudier TOKAM2D. Deux mesures Lagrangiennes : λ_1 (o) et λ_2 (□). Une mesure Eulérienne : λ_3 (×). Le critère direct et global de mesure du Lyapunov : λ_4 (*).

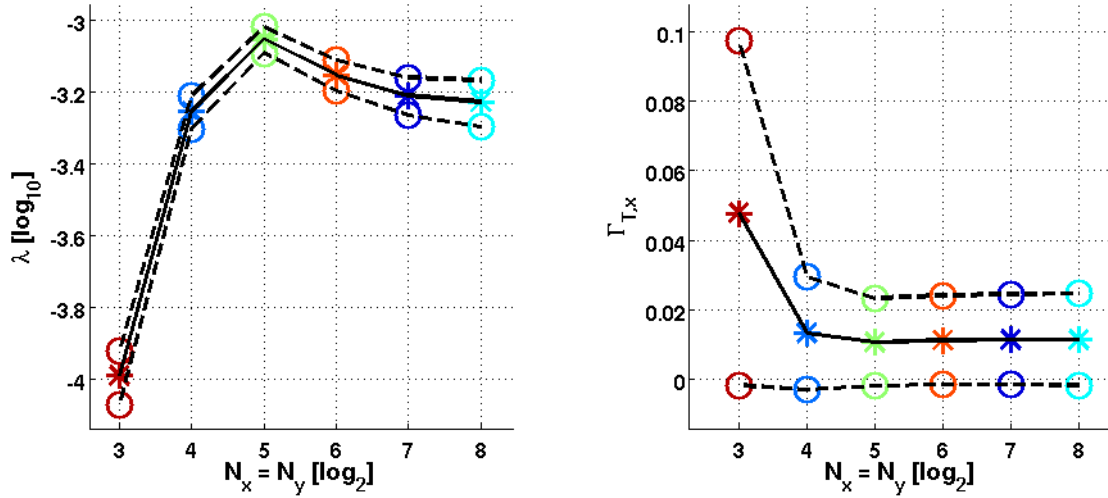


3.2.3 Fiabilité et caractérisation d'un système chaotique

Si le chaos empêche toute prédiction précise de l'état d'un système au-delà d'un horizon T en temps, il n'en change pas le comportement physique : les équations restent les mêmes à chaque instant, le déterminisme n'est pas remis en cause. Dans le cas de la turbulence, on considère des réalisations différentes mais indiscernables du point de vue des propriétés statistiques.

3.2.3.1 Le degré de chaos n'est qu'une des observables du système

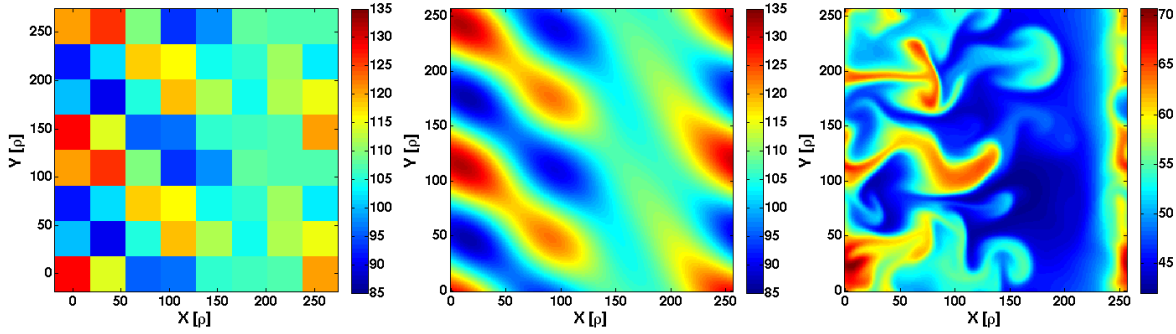
A partir des sorties de simulations chaotiques de TOKAM2D, la méthode PoPe permet de retrouver les équations de TOKAM2D, ainsi que l'ordre de convergence des méthodes numériques employées. A mesure que la discrétisation est améliorée, le degré de chaos converge aussi vers une valeur finie, comme toutes les observables du système. Par sa signification, il donne une information importante sur les changements qualitatifs du comportement des systèmes simulés (voir figure 3.12).



(a) Coefficient d'exponentiation locale λ pour différentes tailles de maillage $N_x \times N_y$. (b) Flux radial de particules Γ_{Tx} pour différentes tailles de maillage $N_x \times N_y$.

FIGURE 3.12 – Dépendance en fonction de la taille du maillage du coefficient de Lyapunov λ (Fig. 3.12a) et du flux turbulent de densité dans la direction radiale x . Étoiles '*': valeur moyenne, cercles 'o': valeur moyenne \pm l'écart-type. Ces deux grandeurs convergent à mesure que le maillage s'améliore. Le cas $N_x = N_y = 8$ est largement sous résolu ce qui empêche le développement de turbulence (voir Fig. 3.13).

La méthode pseudo-spectrale du code TOKAM2D, de par sa robustesse, peut simuler des régimes largement sous-résolus mais dont les opérateurs sont correctement estimés dans la partie valide de la dynamique : l'erreur ε_v est très faible. A l'inverse, la sous résolution fait que l'erreur ε_Φ est grande, le nombre de degrés de liberté numérique étant trop faible pour que la simulation soit réaliste. Cette contrainte sur le nombre de degrés de liberté empêche certain phénomènes d'auto-organisation d'apparaître.



(a) Cas sous résolu :
 $N_x = N_y = 2^3 = 8$.

(b) Cas Fig. 3.13a affiché
sur une grille fine (256×256). $N_x = N_y = 2^8 = 256$.

(c) Cas standard :

FIGURE 3.13 – Comparaison de deux simulations standards (type S1). Sur la figure 3.13a le maillage $N_x = N_y = 8$ est trop faible pour décrire toutes les échelles d'espace et de temps correctement. La turbulence ne se développe pas. Figure 3.13b : projection sur un maillage de $N_x = N_y = 256$ de la simulation $N_x = N_y = 8$ illustrée figure 3.13a. La figure 3.13c illustre une simulation utilisant un maillage $N_x = N_y = 256$: le comportement turbulent du système est retrouvé.

En dégradant le maillage, en diminuant le nombre de degrés de liberté numériques que sont les modes de Fourier présents dans le système, la taille des structures finit par être contrainte : les plus petites structures sont filtrées, certaines structures deviennent stables, il y a moins de couplages potentiellement réalisables. Pour une simulation standard de TOKAM2D, ce problème est présent pour un maillage $N_x \times N_y = 8 \times 8$ (voir Fig. 3.13).

3.2.3.2 Les erreurs numériques ne changent pas la statistique

Même si les équations retrouvées dans les sorties d'un code sont proches des équations théoriques, il est légitime de se demander quel est l'impact des erreurs numériques commises à chaque pas de temps d'intégration, surtout lorsqu'un modèle est utilisé en régime chaotique. Si ces erreurs ne sont pas structurées au point de modifier l'équation analytique discrétisée, alors l'erreur ε_1 commise au temps t par le modèle discrétisé peut-être vue comme une incertitude ε_2 à l'instant $t - \Delta t$. Soit l'équation $\partial_t x(t) = f(x, t)$ à résoudre, l'équation eq.(3.27) est la solution du modèle analytique, l'équation eq.(3.28) est la solution entachée d'une erreur ε_1 obtenue à partir du modèle discrétisé et l'équation eq.(3.29) fait le lien entre l'erreur commise par la méthode numérique et une incertitude ε_2 sur la donnée initiale de la solution analytique.

$$x(t - \Delta t) + \int_{t-\Delta t}^t f(x(s), s) ds = x(t) \quad (3.27)$$

$$x(t - \Delta t) + \Delta t \tilde{f}(x, t) = x(t) + \varepsilon_1 \quad (3.28)$$

$$x(t - \Delta t) + \varepsilon_2 + \int_{t-\Delta t}^t f(x(s) + \varepsilon_2, s) ds = x(t) + \varepsilon_1 \quad (3.29)$$

Ce point de vue traduit le fait qu'il existe une trajectoire théorique (non entachée d'erreur) qui se trouve très proche de la série temporelle issue de la simulation. Une simulation explorerait l'attracteur en sautant de trajectoires voisines en trajectoires voisines à cause des erreurs numériques. La répétition d'erreurs non structurées à chaque pas d'intégration n'accélère ou n'augmente pas le degré de chaos, la physique reste statistiquement la même.

3.2.3.3 Caractérisation d'un système dont la discrétisation est forcée

Connaître les équations d'un système donné n'est pas équivalent à le comprendre, bien que sa dynamique soit contenue dans ses équations analytiques. La simple analyse d'équations permet difficilement de prédire les phénomènes complexes d'auto-organisation ou de faire des réductions analytiques qui conserveraient une part de la phénoménologie du modèle complet. Dans le cas de systèmes chaotiques, les prédictions analytiques sont difficiles. L'approche numérique, de par la puissance des ordinateurs, est capable de simuler l'évolution d'un système virtuel comportant un nombre important de degrés de liberté. L'analyse des données produites par les diagnostics numériques est une approche plus aisée, mais moins directe et potentiellement entachée d'erreur par rapport à l'étude analytique. Une approche sur la base de simulations numériques doit considérer deux types de problèmes :

- les erreurs lors de l'estimation des équations, par exemple les sur/sous estimations d'opérateurs ou l'ajout d'opérateurs indésirés tels que la viscosité numérique.
- la limite sur le nombre de degrés de liberté utilisables, certains problèmes nécessitent de décrire de grands domaines sur des temps longs tout en prenant en compte des événements à petites échelles et de courtes durées.

Ces deux limites vont modifier le comportement du système en changeant sa dynamique et en interdisant certains états au système. Les termes d'erreur ε_v (l'erreur comprise dans la dynamique valide) et ε_Φ (l'erreur comprise dans la dynamique non valide), introduits avec la méthode PoPe, permettent une mesure simple et précise de ces deux limites. Au-delà de la résolution précise d'équations pour une simulation, une question qu'il est légitime de se poser est de savoir ce qui définit un système discrétisé, lorsque la connaissance seule des équations qui le régissent devient une information partielle. L'étude de l'histoire, de la dynamique intégrée au cours du temps, de ce système semble la meilleure approche. L'étude de la dynamique sur des temps comparables ou supérieurs à T (l'horizon imposé par le chaos) nécessite une approche statistique car une réalisation unique a un pouvoir prédictif d'autant plus faible que le degré de chaos est élevé. Répéter une simulation en perturbant les conditions initiales ou modifier le modèle pour propager l'incertitude initiale permet de tenir compte de la nature chaotique du système. L'état final d'un phénomène est alors décrit par une densité de probabilité (qui serait un Dirac en l'absence de chaos). Une densité de probabilité apporte une information sur la statistique du système mais sa dynamique reste manquante. Le critère le plus approprié pour étudier une grandeur X me semble être une densité de probabilité à 2 dimensions de l'espace des phases $(X, \partial_t X)$. Ce diagnostic est capable d'associer à toute réalisation de X , une densité de probabilité de son évolution. Dans le cas où $\partial_t X = f(X)$, alors

l'évolution de X est entièrement déterminée par X lui-même. L'étude statistique met en évidence l'application surjective déterministe $f(\cdot)$, un unique $\partial_t X$ est associé à chaque état X . L'étude statistique effectuée au cours du temps apporte une information sur le temps passé par X dans chacun de ces états, mais aucune ambiguïté n'est présente sur la relation $\partial_t X = f(X)$. Dans le cas où l'évolution de X dépend d'une variable supplémentaire Y , tel que $\partial_t X = f(X, Y)$, une incertitude apparait dans la densité de probabilité de $(X, \partial_t X)$: l'étude statistique associera autant de valeurs de $\partial_t X$ à un X qu'il y a de nuances apportées par la variable Y . La statistique temporelle permet de mettre en avant les états les plus probables mais retrouver l'équation $f(X, Y)$ n'est pas possible en utilisant seulement les deux dimensions $(X, \partial_t X)$. Il faudrait une densité de probabilité à 3 dimensions $(Y, X, \partial_t X)$ pour lever toute incertitude. Le système de Lorenz contient 3 degrés de liberté (x, y, z) . Une réalisation X est donc un triplet $(x, y, z) = X$. L'évolution du système associé à X est $(\partial_t x, \partial_t y, \partial_t z) = \partial_t X$. La combinatoire augmente trop rapidement pour appliquer une telle procédure à un code tel que TOKAM 2D, avec $2 \times N_x \times N_y$ degrés de libertés. L'étude complète du système n'étant pas possible (et trop riche en information), il est nécessaire de réduire le nombre de degrés de liberté. Pour mes études, dans la mesure où je m'intéresse au transport turbulent, je décide d'utiliser des études statistiques sur le flux turbulent dans la direction radiale $\Gamma_{T,x}$. Lorsque le nombre de diagnostics ne permet pas une étude à 2 dimensions $(\partial_t \Gamma_{T,x}, \Gamma_{T,x})$, je me restreins aux deux densités de probabilité 1D de $\partial_t \Gamma_{T,x}$ et $\Gamma_{T,x}$. Deux simulations présentant les mêmes propriétés statistiques seront considérées comme équivalentes.

3.3 Compétition entre chaos et transport turbulent

Dans la section 3.2.2, nous avons étudié l'impact de la viscosité ν sur le degré de chaos du système. Dans cette section nous complétons cette analyse en considérant l'impact de ν et du degré de chaos sur l'efficacité du transport turbulent. Le phénomène d'avalanche a été identifié dans TOKAM2D comme étant le principal mécanisme de transport, devant les effets diffusifs [Ghendrih 2003]. L'étude du transport est donc en grande partie celle des avalanches.

3.3.1 Restriction théorique de ν à de faibles valeurs

L'action de la viscosité ν est de dissiper les plus petites structures, donc de modifier le système aux petites échelles. Cependant après quelques étapes d'intégration temporelle, le changement de dynamique n'est plus dû à la présence directe du terme $\nu\Delta W$ (qui reste en valeur absolu faible) mais au changement de comportement des termes induits par la modification du spectre (voir Fig. 3.14 pour les longueurs et temps de corrélation). L'opérateur $\nu\Delta W$ contrôle directement la taille des structures de la vorticit , donc par l' quation eq.(3.3) il contrôle aussi la taille des structures du potentiel et finit par modifier la taille des structures du champ de densit . Changer la taille des structures alors que la taille de la bo te de simulation est d'une taille finie implique une modification du nombre de degr s de libert  pr sents dans le syst me. Pour une tr s forte viscosit , un syst me normalement turbulent peut devenir stable.

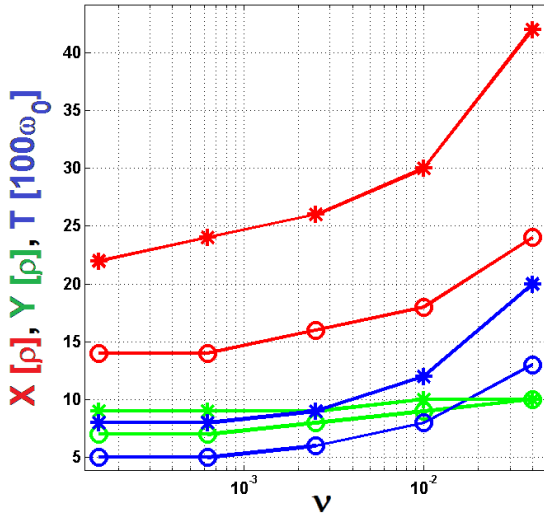


FIGURE 3.14 – Longueurs de cor lation dans la direction x (rouge), y (vert) et dans le temps (bleu) de la densit  ('o') et du potentiel ('*') en fonction de ν .

3.3.2 Forte variation du transport turbulent avec la viscosit  ν

Une mesure du transport turbulent est l' tude statistique du profil de densit . La figure 3.15 illustre les 2 premiers moments statistiques de la densit , la valeur moyenne et l' cart-type, pour diff rentes valeurs de ν . L' tude statistique est faite en fonction du temps et de l'angle, dans le plan (t, y) .

L'étude de la moyenne, et plus particulièrement de son gradient, permet de mesurer directement l'efficacité du transport. Un transport efficace tend à aplatir le profil de densité en déplaçant la matière située dans les régions de forte densité, vers les régions de faible densité. Si le gradient est fort, cela traduit une réduction du transport vers la limite où tout le transport est diffusif. Une tendance claire se dégage dans la plage de $\nu \in [10^{-5}, 4 \times 10^{-2}]$: plus la viscosité augmente, plus le transport dans la direction x est efficace. Pour la seconde plage $\nu \in [2^2 \times 10^{-2}, 2^7 \times 10^{-2}]$, nous voyons apparaître une inversion locale du gradient dans la région $x \in [10\rho, 75\rho]$: cette inversion est due à la présence de cellules de convection quasi permanentes au niveau de la source.

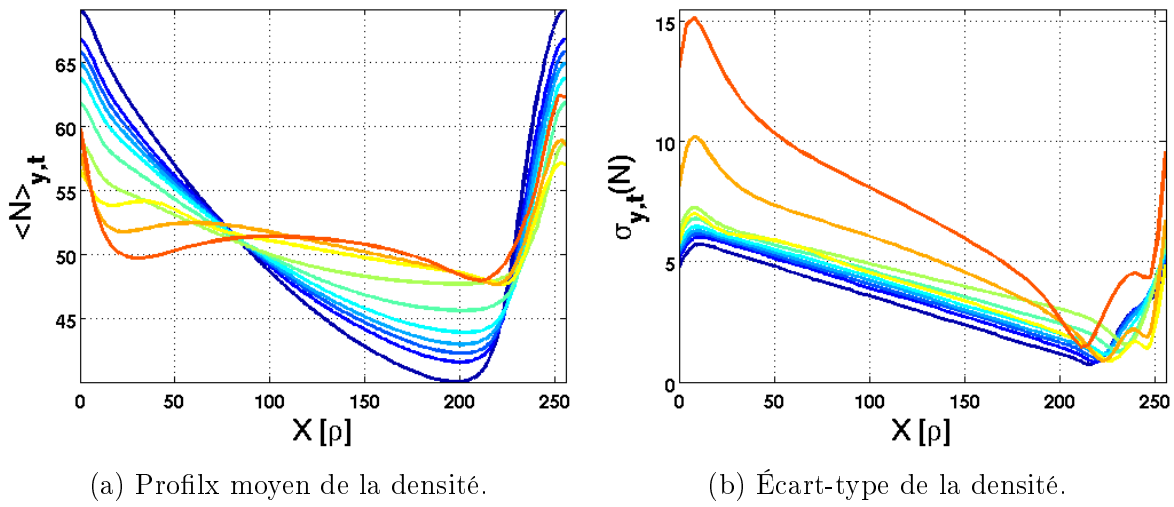
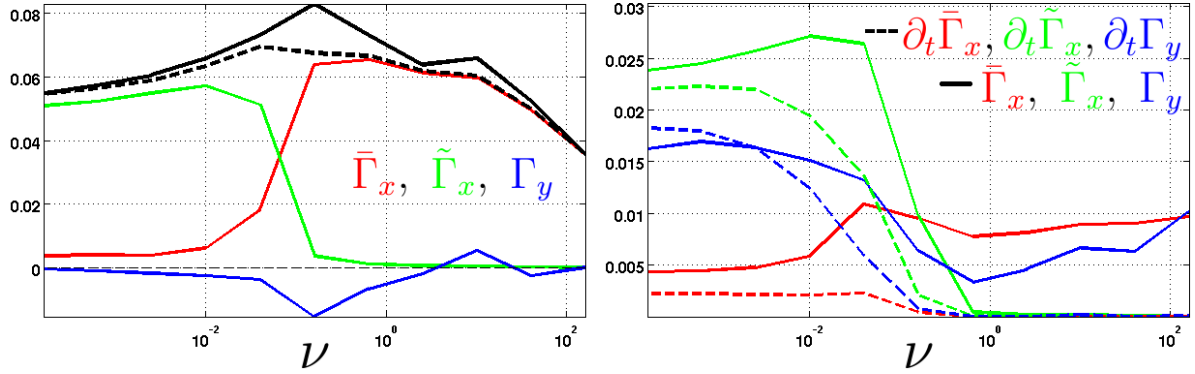


FIGURE 3.15 – Profils dans la dimension x de la moyenne et de l'écart-type de la densité. Couleurs du rouge au bleu foncé : $\nu = 256.0 \times 10^{-2}$, $\nu = 64.0 \times 10^{-2}$, $\nu = 16.0 \times 10^{-2}$, $\nu = 4.0 \times 10^{-2}$, $\nu = 1.0 \times 10^{-2}$, 2.5×10^{-3} , $\nu = 6.25 \times 10^{-4}$, $\nu \simeq 1.56 \times 10^{-4}$, $\nu \simeq 3.91 \times 10^{-4}$ et $\nu \simeq 9.76 \times 10^{-6}$

L'écart-type nous renseigne sur l'amplitude des variations de densité, donc l'amplitude relative des blobs et trous lorsque un régime turbulent est établi. Pour une première gamme $\nu \in [10^{-5}, 4 \times 10^{-2}]$, lorsque la viscosité diminue, l'amplitude des blobs et des trous diminue. En tenant compte de la diminution des longueurs et temps de corrélation (voir Fig. 3.14), une tendance de baisse du transport turbulent se dessine. La seconde plage $\nu \in [4 \times 10^{-2}, 256 \times 10^{-2}]$, l'écart-type augmente rapidement avec la viscosité. L'observation des champs de densité et potentiel en 2 dimensions met en évidence l'origine de cette croissance : un pseudo-équilibre formé de quelques modes de Fourier variant lentement avec le temps. L'écart type traduit alors l'amplitude de ces structures quasi-permanentes qui ne sont pas des avalanches.

La mesure directe des flux et en particulier des différents termes contribuant au flux radial permet de confirmer le résultat de l'étude des profils. Soit $\bar{N} = \langle N(x, y, t) \rangle_{t:t+t_{corr}}$ la définition d'un quasi-équilibre en 2 dimensions obtenu en moyennant la densité sur une durée t_{corr} assurant l'indépendance des valeurs $N(x, y, t)$ et $N(x, y, t + t_{corr})$. Soit $\tilde{N} = N(x, y, t) - \bar{N}$ la partie oscillante du champ N . Soit $\Gamma_T = (\Gamma_x, \Gamma_y) = (-N\partial_y\phi, N\partial_x\phi)$

le flux turbulent. Nous décomposons le flux radial en une partie basse fréquence de quasi-équilibre de la densité et une partie due aux oscillations haute fréquence de la densité : $\Gamma_x = \bar{\Gamma}_x + \tilde{\Gamma}_x = -\bar{N}\partial_y\phi - \tilde{N}\partial_y\phi$. Les grandeurs reportées sur les figures sont moyennées en temps et dans l'intervalle $x \in [L_x/3, L_x/2]$.



(a) Moyenne des flux en fonction de ν .
Noir discontinu : $\Gamma_x = \bar{\Gamma}_x + \tilde{\Gamma}_x$,
Noir continu : $\Gamma = |\bar{\Gamma}_x + \tilde{\Gamma}_x| + |\Gamma_y|$.

(b) Écart-type des flux (en traits continus) et écart-type de la dérivée temporelle des flux (en traits discontinus) en fonction de ν .

FIGURE 3.16 – Étude de la dépendance des flux par rapport à ν . Les flux sont mesurés sur une section étroite de la boîte en x ($x \in [L_x/3, L_x/2]$) pour éviter les effets de bords (présence de la source et de la zone stable).

La figure 3.16 confirme l'existence de deux régimes et de deux types de transport. L'intervalle $\nu \in [10^{-5}, 4 \times 10^{-2}]$ correspond à un régime où le transport est assuré par le flux $\tilde{\Gamma}_x$ et l'intervalle $\nu \in [4 \times 10^{-2}, 160]$ correspond à un régime où le transport est assuré par le flux $\bar{\Gamma}_x$. Le flux dans les directions y est négligeable dans le premier régime et reste faible dans le second régime mais un changement de son signe (sa direction privilégiée) apparaît. L'écart-type des flux et de la dérivée temporelle des flux met en évidence une variation dans l'espace et dans le temps plus importante pour $\tilde{\Gamma}_x$ et Γ_y lorsque ν diminue. Dans le deuxième intervalle de ν , le transport n'est plus assuré que par $\bar{\Gamma}_x$ et l'écart type des flux montre une absence d'intermittence dans le transport. En résumé, dans le premier régime de $\nu \in [10^{-5}, 4 \times 10^{-2}]$, des avalanches sont visibles dans les simulations, la turbulence est pleinement développée. Dans le deuxième cas le transport est assuré par la convection de la densité le long de structures de potentiel à grande échelle et quasi-permanentes : la turbulence disparaît. Non seulement l'intensité du transport dans le système dépend de ν mais la nature du transport dépend aussi de ν . Le maximum d'efficacité du transport dans la direction x est obtenu pour les valeurs de ν maximales permettant le développement de turbulence.

3.3.3 Relation entre maximum de transport, chaos et flux zonaux

Sur la figure 3.17 sont reportés les flux caractéristiques et le degré de chaos mesurés sur un ensemble de simulations TOKAM2D. La forte variation du degré de chaos dans l'intervalle $\nu \in [2^2 \times 10^{-2}, 2^6 \times 10^{-2}]$ correspond à la transition entre le régime quasi-stationnaire et le régime turbulent. C'est à la fin de ce saut que se situe le maximum de transport turbulent, pour un degrés de chaos significatif mais qui reste "intermédiaire". Il n'y a pas de corrélation directe entre l'augmentation du degrés de chaos et l'augmentation du transport sur l'ensemble des viscosités testées mais essentiellement un seuil de chaos à dépasser pour enclencher la turbulence. En dessous de ce seuil, $\nu \simeq 10^{-1}$, l'observation des champs de densité et potentiel en 2 dimensions suggère que la turbulence se porte sur échelles de plus en plus petites ce qui diminuent la longueur et le volume des avalanches. A l'échelle globale du système, les avalanches agissent comme les pas d'une marche aléatoire anisotrope (fortement dirigée dans la direction x de façon statistique) et diminuer la taille de leur pas diminue l'efficacité de leur transport. En homogénéisant le système à petite échelle, le chaos renforce même les gradients à plus grande échelle.

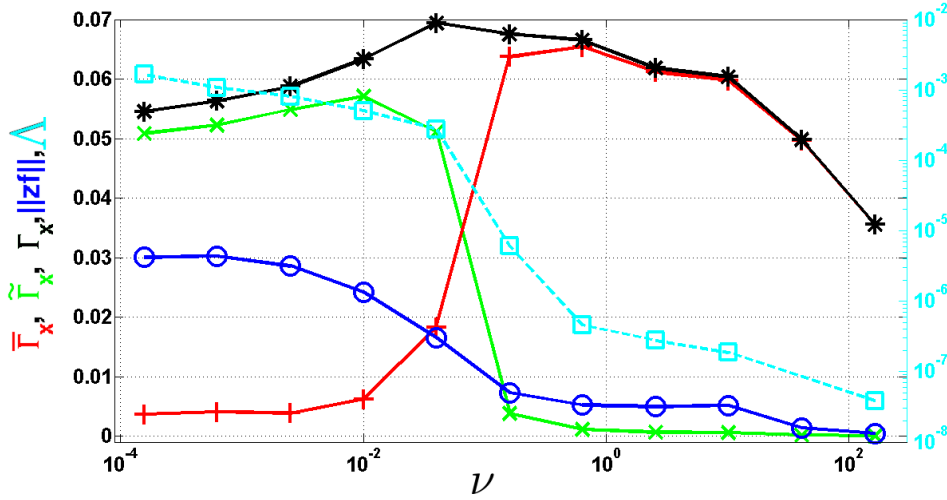


FIGURE 3.17 – Superposition des profils de $\bar{\Gamma}_x$, $\tilde{\Gamma}_x$, $\Gamma_x = \bar{\Gamma}_x + \tilde{\Gamma}_x$, $\|zf\| = \left\langle |\langle \phi \rangle_y| \right\rangle_x$ (importance des flux zonaux) et Λ (degré de chaos) en fonction de la viscosité ν .

La diminution de transport turbulent par avalanche est souvent attribuée à des «flux zonaux», des flux qui se déplacent perpendiculairement à la direction radiale, sur des grandes distances et des temps longs (voire très long pour les «flux moyens»). Ces phénomènes sont générés par des structures de potentiel qui sont décrites comme des barrières de transport agissant sur les avalanches en les déformant et en homogénéisant la densité par diffusion (voir [Floriani 2013]). Les écoulements zonaux sont générés par l'ensemble des modes $k_y = 0$ (ne variant pas en y) du potentiel électrique, soit $\phi_{ZF} = \langle \phi \rangle_y$. L'effet des écoulement zonaux se traduit par un champ d'advection $V_{ZF} = \partial_x \phi_{ZF} = (0, \partial_x \phi_{ZF})$ dans la direction poloïdale et par le champ de déformation $s_{ZF} = \partial_x^2 \phi_{ZF}$, le cisaillement de l'écoulement zonal. Ces flux agissent sur les blobs en les vidant de leur matière jusqu'à dépasser un seuil en dessous duquel les blobs ne peuvent plus générer de séparation

de charge (terme g) pour maintenir la dynamique de leur déplacement. Sur la figure 3.17, l'intensité de l'écoulement zonal, mesurée par $||zf|| = \langle |\phi|_y \rangle_x$, est reportée en fonction de ν . On observe une première phase de croissance des flux zonaux lorsque ν décroît de $2^4 \times 10$ à 2^4 , associée à un transport non turbulent. Puis, une seconde phase de croissance pour ν diminuant de $2^4 \times 10^{-2}$ à 10^{-2} se produit en même temps que la transition du transport convectif non turbulent au transport turbulent. Enfin une lente décroissance du flux turbulent se produit pour les viscosités inférieures alors que les flux zonaux restent à une valeur constante. De telles mesures ne permettent pas d'établir de relation de cause à effet simple sur l'ensemble des valeurs de ν étudiées. Ces mesures mettent en question l'effet de barrière attribué aux flux zonaux seul. Pour appuyer ce constat, des simulations de TOKAM2D ont été réalisées en forçant les modes $k_y = 0$ du potentiel électrique à une amplitude nulle : aucun impact significatif n'a été observé sur le transport. Il apparaît que l'amplitude des écoulements zonaux seuls est trop faible pour expliquer la saturation non-linéaire de la turbulence.

3.4 Réductions contrôlées du modèle de TOKAM2D

La réduction de modèle est un exercice permettant d’approfondir la compréhension d’un système en le simplifiant, ce qui aura pour conséquence de faciliter sa simulation. Avant tout, il est nécessaire d’exprimer précisément quels sont les critères d’intérêt que nous voulons conserver et avec quelle marge d’erreur une fois le modèle réduit. L’établissement de critères qualitatifs comme quantitatifs est possible. Ensuite, la réduction pourra emprunter deux voies qui ne sont pas exclusives : la modification des équations du modèle qui peut aller jusqu’à l’utilisation de modèles phénoménologiques, ou l’optimisation de la discrétisation dans le but de restreindre au minimum le nombre de degrés de liberté nécessaires à la description précise du système, en utilisant une base adaptée à la discrétisation du système. La mesure de la qualité de la réduction utilise PoPe :

- 1 Une ou plusieurs simulations du code TOKAM 2D complètes sont nécessaires.
- 2 Une mesure de la dynamique recherchée dans les simulations complètes est établie. Dans le cas de la vérification de l’équation eq.(3.1), la dynamique recherchée est $\partial_t N$. Dans le cas d’une réduction de modèle, la dynamique recherchée peut être par exemple l’évolution des profils $\langle \partial_t N \rangle_y = f(\langle N \rangle_y)$.
- 3 La méthode PoPe est utilisée pour déterminer des poids optimaux pour chacun des opérateurs du modèle réduit ainsi que ε , la part de la dynamique cible qui n’a pas été captée, soit pour l’exemple ci-dessus : $\langle \partial_t N \rangle_y = f(\langle N \rangle_y) + \varepsilon$. Ces estimations requièrent peu de temps de calcul, ainsi elles peuvent être répétées sur un grand nombre de modèles à tester.
- 4 Une première analyse de la performance du modèle réduit est réalisée en observant le comportement du poids des opérateurs : sont-ils constants dans les différentes dimensions du problème ? (= les équations réduites sont-elles invariantes dans l’espace et le temps ?). Par ailleurs, le terme ε est comparé à la dynamique cible $\langle \partial_t N \rangle_y$ à l’aide de différentes normes pour estimer quelle information instantanée est perdue.
- 5 Un sous-ensemble de modèles réduits sélectionnés à l’étape 4 sont implémentés pour déterminer l’impact de la possible variation des poids des opérateurs dans l’espace ainsi que pour vérifier la nature de l’information perdue sur des temps longs, et non instantanément.

Les réductions de modèles présentées dans cette section portent sur la dynamique proie-prédateur de certaines simulations de TOKAM2D, section 3.4.1. La réduction du transport turbulent à un transport de type diffusif, convectif ou une combinaison des deux est ensuite étudiée section 3.4.2. Enfin, la simple dégradation de la discrétisation d’une simulation TOKAM2D dans le but de réduire le temps de calcul sans modifier le modèle analytique est explorée section 3.4.3.

3.4.1 Modèle type proie-prédateur : avalanches quasi-périodiques

Le modèle proie-prédateur de Lokta-Volterra est un système de deux équations (eq.(3.30-3.31)) à deux inconnues qui permet de simuler la dynamique de deux populations dites proie (variable x) et prédateur (variable y).

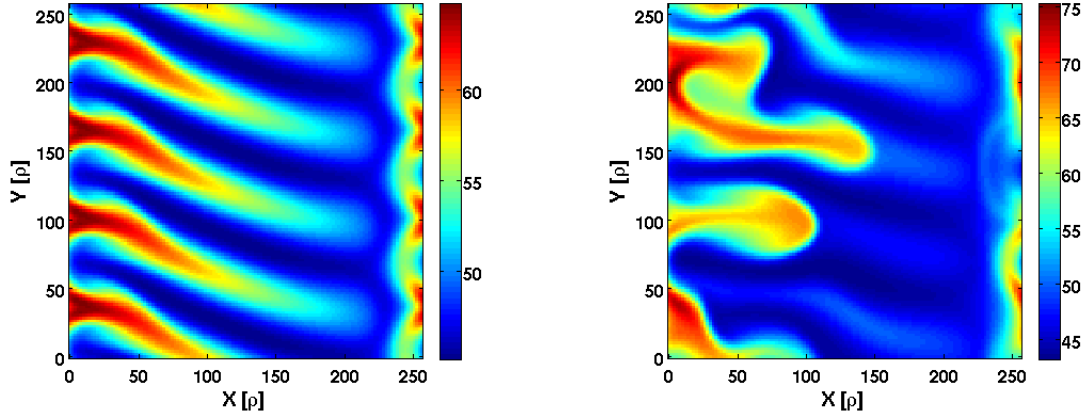
$$\frac{dx(t)}{dt} = \alpha x(t) - \beta y(t)x(t) \quad (3.30)$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\gamma y(t) + \delta x(t)y(t) \quad (3.31)$$

où $[\alpha, \beta, \gamma, \delta]$ sont des paramètres réels positifs non nuls. Pour ce problème où il existe un invariant $H = \delta x + \beta y - \log(x^\gamma y^\alpha)$, on peut montrer que les trajectoires sont périodiques. Une population de proies x non nulle fait croître la population de prédateurs y qui se nourrissent de proies pour faire croître leur population au détriment du stock de proies. Si la baisse de la population de prédateurs causée par la compétition pour accéder aux proies est plus rapide que celle de décroissance de la quantité de proies, alors les quelques prédateurs survivants engageront un second cycle de prédation. Ce système d'exclusion de deux variables qui interagissent fortement se retrouve dans nombre de phénomènes physiques complexes comme en physique des plasmas [Schmitz 2014] et en particulier dans des simulations de TOKAM2D.

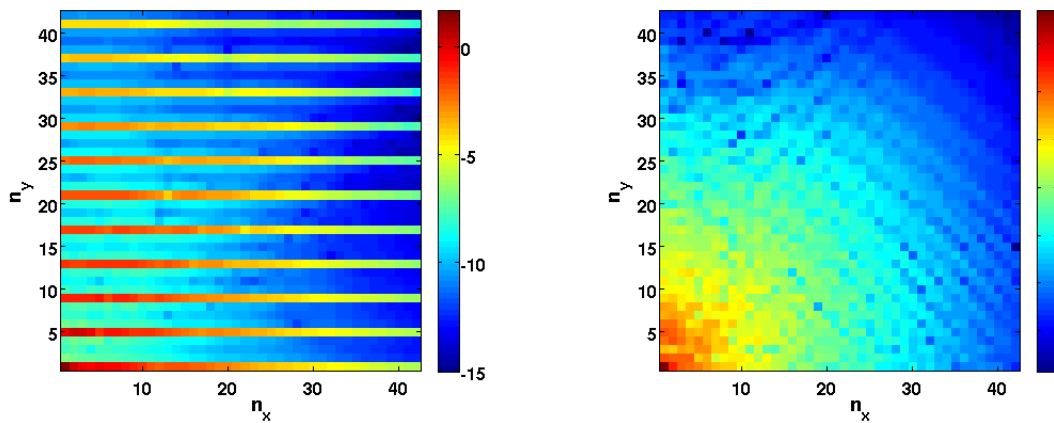
Un comportement quasi-périodique est observé pour un jeu de paramètres standards à l'exception de la viscosité augmenté à $\nu = 16 \times 10^{-2}$ et de la résolution du maillage légèrement dégradée $N_x \times N_y = 2^7 \times 2^7$. Dans ces conditions, un régime quasi-stationnaire présent pendant une longue durée (voir Fig. 3.18a) laisse place à une courte relaxation turbulente (voir Fig. 3.18b) avant de revenir à un état quasi stationnaire. La visualisation des champs dans l'espace de Fourier montre la nature des deux espèces : une proie fortement périodique (modes $n_y = 4 \times n$, $n \in \mathbb{N}$, voir Fig. 3.19a) et un prédateur représenté par les autres modes (Fig. 3.19b). D'un point de vue analytique, la proie ne devrait pas voir son spectre s'enrichir sous l'action des crochets de Poisson, des Laplaciens ou de la source : ce sont les termes de puits et le couplage de l'instabilité avec les autres modes présents qui enrichissent le spectre jusqu'à déclencher la relaxation.

Soit le filtre $f(N) = N_{proie}$ qui sélectionne les modes constituant la proie dans le régime stable (Fig. 3.18a et Fig. 3.19a). Nous définissons les grandeurs suivantes : la proie $x(t) = \int |f(N)| dx dy$, un premier prédateur $y(t) = \int |N - f(N)| dx dy$ et un second prédateur $z(t) = \int |\phi - f(\phi)| dx dy$ (basé sur le potentiel ϕ). Les figures 3.20 reportent les traces temporelles de ces trois espèces dans une simulation de TOKAM2D. Leur dynamique en dents de scie est caractéristique d'un système proie-prédateur.



(a) $N(t = 2.5 \times 10^5)$, proie \simeq streamers. (b) $N(3.7 \times 10^5)$, prédateurs \simeq turbulence.

FIGURE 3.18 – Illustration des deux régimes avec et sans turbulence dans l'espace réel. La proie est caractérisée par les modes multiples de 4 en y . Le prédateur est décrit par les autres modes.



(a) $\hat{N}(t = 2.5 \times 10^5)$, proie \simeq forte périodicité. (b) $\hat{N}(3.7 \times 10^5)$, prédateur \simeq bain de modes.

FIGURE 3.19 – Illustration des deux régimes avec et sans turbulence dans l'espace de Fourier. La proie est caractérisée par les modes multiples de 4 en y . Le prédateur est décrit par les autres modes.

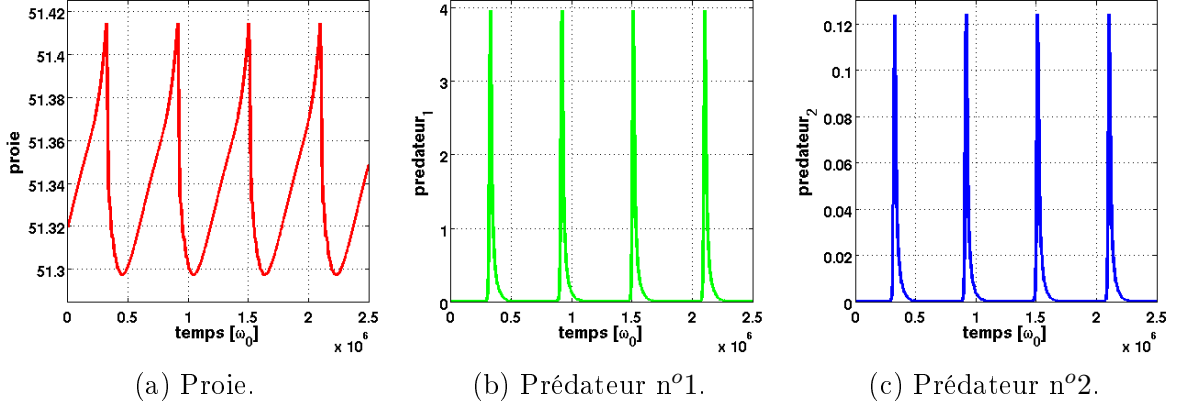


FIGURE 3.20 – Illustration des traces temporelles de la proie $x(t) = \int |f(N)| dx dy$, du premier prédateur $y(t) = \int |N - f(N)| dx dy$ et du second prédateur $z(t) = \int |\phi - f(\phi)| dx dy$. Ces oscillations sont caractéristiques des systèmes proie-prédateur.

Les figures 3.21 sont réalisées en utilisant 10 simulations partant de conditions initiales légèrement perturbées (similaires à celles utilisées pour mesurer les Lyapunov section 3.2.2.3) afin d'augmenter la statistique et tester la robustesse de ce régime. Cette troisième série de figures illustre 3 projections en 2D des relations binaires entre chaque espèce. Les deux prédateurs ont des comportements comparables vis à vis de la proie mais le premier prédateur est sensiblement plus rapide à se reproduire que le second.

La difficulté de la réduction est de mettre en évidence les espèces présentes car un mauvais choix peut conduire à une trop grande sensibilité aux perturbations. L'attracteur peut alors être diffus car la définition de l'espèce accorde trop d'importance à des détails qui ne contribuent pas à influencer la dynamique. L'attracteur recherché peut aussi être trop complexe pour conduire à un jeu simple d'équations qui le reproduiraient, comme l'attracteur basé sur la mesure des flux Fig. 3.21d : l'attracteur se recoupe en trois points de l'espace $(\Gamma_{T,X}, \Gamma_{T,Y})$ et à une unique valeur de $\Gamma_{T,X}$ ($\Gamma_{T,X} \sim 0.0575$) on peut associer jusqu'à 10 valeurs distinctes de $\Gamma_{T,Y}$.

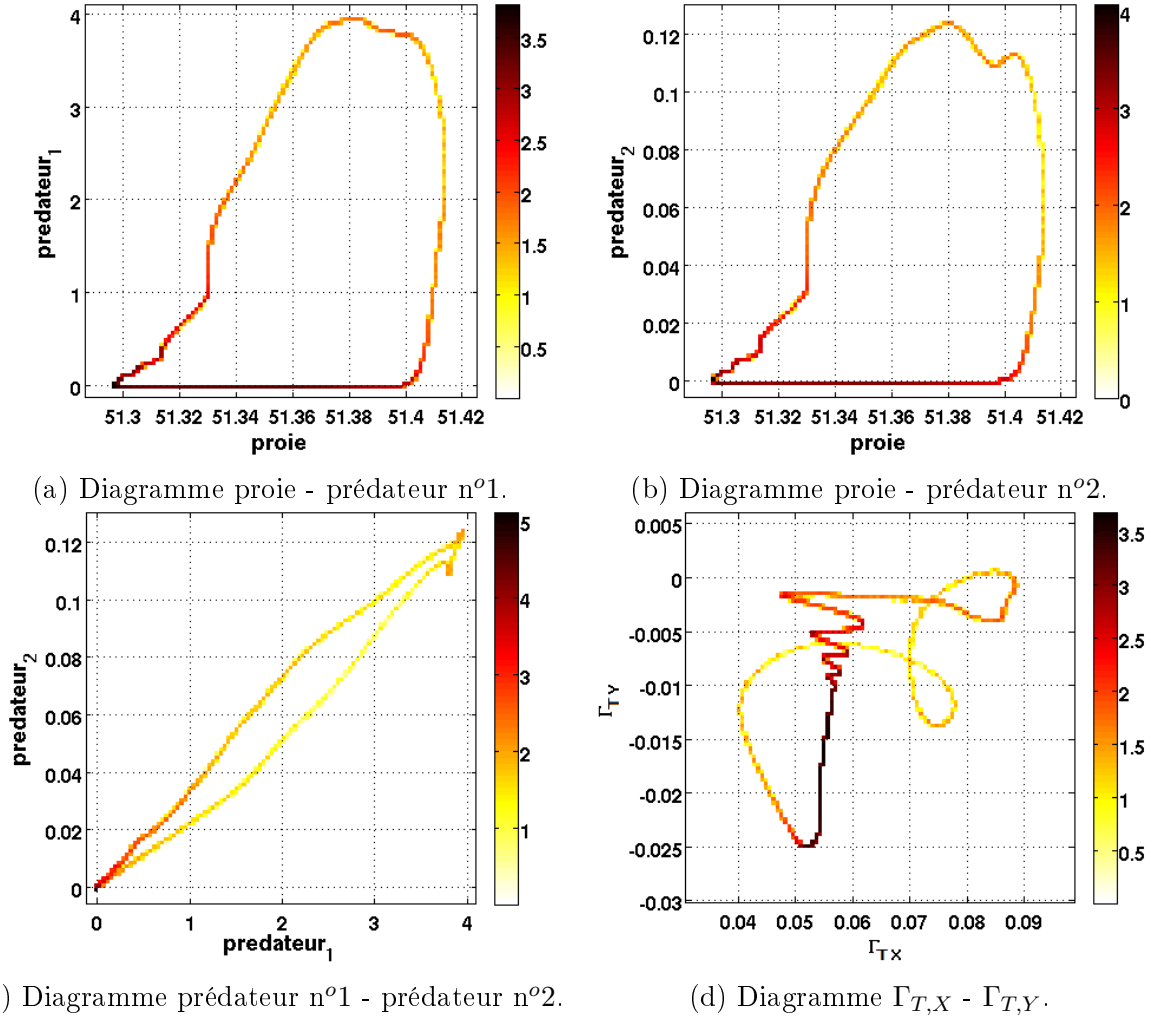


FIGURE 3.21 – Illustration des cycles proie-prédateur par des densités de probabilité en 2 dimensions. L'augmentation locale de la statistique traduit le temps passé par le système dans cette région de l'espace. Les comportements des deux prédateurs sont semblables par rapport à la proie. Le premier prédateur est en avance sur le cycle de vie du second prédateur. Le diagramme Fig. 3.21d illustre le même cycle mais du point de vue du flux turbulent dans la direction x et dans la direction y ($\Gamma_{T,X}, \Gamma_{T,Y}$).

Une étude analytique du cycle proie - prédateur 1 conduit au modèle suivant :

$$\partial_t x = ax - byx \quad (3.32)$$

$$\partial_t y = c(x - \bar{x})y \quad (3.33)$$

La dynamique de la proie est identique au modèle de Lokta-Volterra, la dynamique du prédateur est sensiblement modifiée pour correspondre aux observations réalisées sur les figures précédentes : une croissance qui n'apparaît que lorsque la quantité de proie franchit un seuil \bar{x} . Les points $\partial_t x = 0$, $\partial_t y = 0$, $\min_t x$ et $\min_t y$ dimensionnent le cycle : ils sont utilisés pour déterminer analytiquement la valeur des différents paramètres.

$$\frac{\partial_t x}{x} = a - by \simeq a \text{ pour } \min_t y : a \simeq 10^{-6} \quad (3.34)$$

$$\partial_t x = 0 \Leftrightarrow b = a/y : b \simeq 5 \times 10^{-7} \quad (3.35)$$

$$\partial_t y = 0 \Leftrightarrow y = 0 \text{ ou } \bar{x} = x : \bar{x} \simeq 51.3823 \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial_t y}{y} = c(x - \bar{x}), \text{ pour } \min_t y : c \simeq 0.2 \quad (3.37)$$

Une détermination directe et unique de chacun des paramètres peut aussi être effectuée en utilisant PoPe : $a = 1.117 \times 10^{-6}$, $b = 6.603 \times 10^{-6}$, $\bar{x} = 51.3743$ et $c = 0.6396$. La valeur de b est différente d'un ordre de grandeur et la valeur de c d'un facteur 3 : analytiquement, changer la méthode d'évaluation des paramètres ne diminue pas cet écart. La résolution des équations pour les deux jeux de paramètres conduit à la figure 3.22. La détermination des paramètres à l'aide de PoPe permet de retrouver les niveaux de saturation des deux espèces avec une faible erreur comparée à la méthode analytique. La dynamique temporelle, caractérisée par la durée d'un cycle, est tout à fait comparable à la mesure de TOKAM2D dans les deux cas. Enfin, changer le modèle analytique testé par PoPe est très rapide une fois qu'un modèle a déjà été testé, par exemple en ajoutant une troisième espèce dans le modèle.

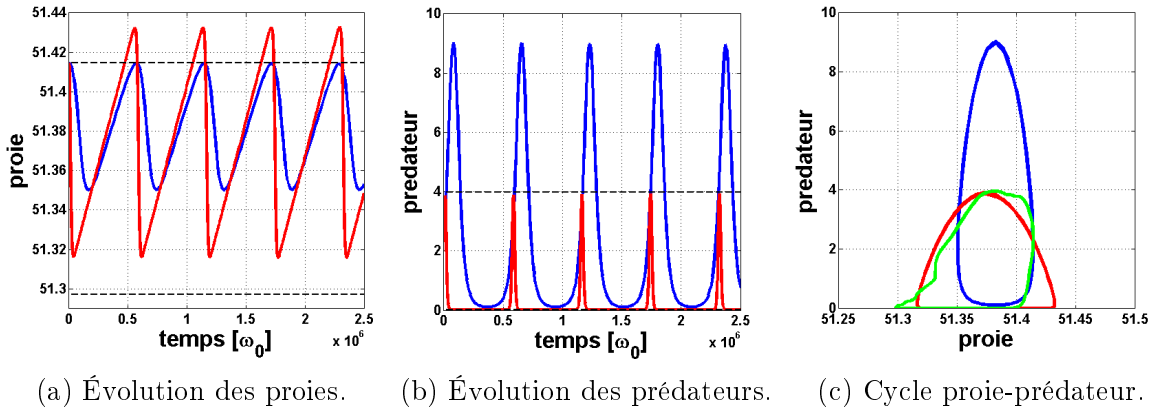


FIGURE 3.22 – Illustration des cycles proie-prédateur obtenus à partir d'un modèle réduit dont les paramètres sont estimés analytiquement (courbes bleues) et avec la méthode PoPe (courbes rouges) dans le but de reproduire une simulation de TOKAM2D. Les extremums des cycles de la simulation cible sont reportés en traits discontinus noirs.

3.4.2 Modèle de diffusion et convection 1D pour les avalanches

La loi de Fick indique que le flux de particules est proportionnel et opposé au gradient de densité. Cette loi inspirée de la loi de Fourier pour la chaleur conduit donc à un modèle diffusif du transport turbulent (voir [Norscini 2014]). Cependant, comme ce modèle n'est pas capable de sonder la dynamique du transport à des échelles intermédiaires de temps et d'espace, un terme de convection est souvent nécessaire pour modéliser des comportements balistiques. J'ai essayé d'appliquer un tel modèle de convection-diffusion à des simulations TOKAM2D pour sonder la dynamique turbulente du transport visible sur le profil moyen de densité $n(x, t) = \langle N(x, y, t) \rangle_y$.

3.4.2.1 Poids constant en x : disparition des avalanches

Une première approche consiste à réécrire l'équation eq.(3.1) et à exprimer la totalité de la dynamique moyennée en y par un terme de convection et un terme de diffusion eq.(3.40). Le puits et la source sont alors pris en compte comme moteurs du transport. La seconde approche exclut de façon explicite ces deux termes (eq.(3.43)). Les deux modèles utilisent des poids $V_{eff}(t)$ et $D_{eff}(t)$ constants dans l'espace réduit à la dimension x mais non contraints au cours du temps. Des modèles intermédiaires sont introduits pour tester l'impact de l'advection et de la diffusion indépendamment l'une de l'autre. L'erreur ε représente la partie de la dynamique qui n'est pas reproduite par le modèle réduit.

$$\begin{aligned} \partial_t N &= -[\phi, N] + D\Delta N - \sigma N e^{\Lambda-\phi} + S \\ \langle \partial_t N \rangle_y &= +D_{eff}(t)\partial_x^2 n + \varepsilon \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\langle \partial_t N \rangle_y = -V_{eff}(t)\partial_x n + \varepsilon \quad (3.39)$$

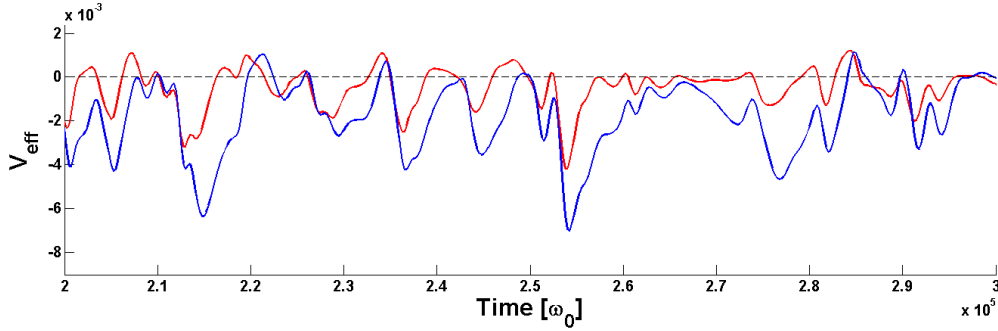
$$\langle \partial_t N \rangle_y = -V_{eff}(t)\partial_x n + D_{eff}(t)\partial_x^2 n + \varepsilon \quad (3.40)$$

$$\langle \partial_t N \rangle_y + \langle \sigma N e^{\Lambda-\phi} \rangle_y - \langle S \rangle_y = +D_{eff}(t)\partial_x^2 n + \varepsilon \quad (3.41)$$

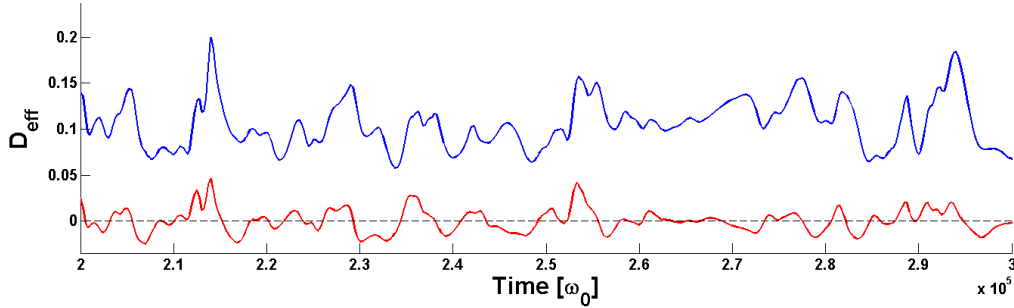
$$\langle \partial_t N \rangle_y + \langle \sigma N e^{\Lambda-\phi} \rangle_y - \langle S \rangle_y = -V_{eff}(t)\partial_x n + \varepsilon \quad (3.42)$$

$$\langle \partial_t N \rangle_y + \langle \sigma N e^{\Lambda-\phi} \rangle_y - \langle S \rangle_y = -V_{eff}(t)\partial_x n + D_{eff}(t)\partial_x^2 n + \varepsilon \quad (3.43)$$

Les figures 3.23 illustrent les poids $V_{eff}(t)$ et $D_{eff}(t)$ des modèles eq.(3.38 - 3.43) au cours du temps. Les modèles eq.(3.38) et eq.(3.39) se superposent avec les deux composantes du modèle eq.(3.40). Il en est de même pour les courbes associées aux modèles eq.(3.41) et eq.(3.42) qui sont identiques à celles du modèle eq.(3.43). Cela traduit que les deux composantes $V_{eff}(t)$ et $D_{eff}(t)$ apparaissent comme complémentaires. Seule l'erreur commise ε diminue lorsque l'on passe des modèles de diffusion ou convection pure au modèle de diffusion et convection. La principale différence entre les modèles eq.(3.40) et eq.(3.43) est la positivité de D_{eff} dans le second modèle. Cette positivité est obtenue en enlevant la contrainte de reproduction du puits $-\sigma N e^{\Lambda-\phi}$ qui évacue la densité au cours du temps. Cette tendance à la décroissance de la densité n'est pas orthogonale avec le terme de diffusion qui a tendance à lisser les perturbations de la densité. La conséquence est que D_{eff} est négatif par moment, ce qui est en contradiction avec les principes de la thermodynamique en plus d'être un problème difficilement simulable. Ces deux éléments doivent nous faire opter pour le modèle eq.(3.43) plutôt que pour le modèle eq.(3.40).



(a) Poids $V_{eff}(t)$: courbe rouge = modèle eq.(3.40), courbe bleue = modèle eq.(3.43).



(b) Poids $D_{eff}(t)$: courbe rouge = modèle eq.(3.40), courbe bleue = modèle eq.(3.43).

FIGURE 3.23 – Traces temporelles des poids $V_{eff}(t)$ et $D_{eff}(t)$ pour le modèle eq.(3.40) (courbes rouges) et pour le modèle eq.(3.43) (courbes bleues). Les modèles eq.(3.38) et eq.(3.39) se superposent aux deux composantes du modèle eq.(3.40). Idem pour les modèles eq.(3.41) et eq.(3.42) avec le modèle eq.(3.43). La principale différence entre les deux modèles est l'absence de valeur négative pour D_{eff} dans le second modèle.

L'étude de ε nous donne une information sur la dynamique non prise en compte par la réduction. Pour des modèles aussi simples que eq.(3.43), périodiques et linéaires, il est possible de construire un outil de simulation implicite dans l'espace de Fourier. En initialisant de tels outils avec les données d'une simulation de TOKAM2D et en utilisant les $D_{eff}(t)$ et $V_{eff}(t)$ obtenus à partir de PoPe, il est possible de comparer l'approche réduite et l'approche complète. La perte engendrée par la réduction à un modèle linéaire est l'impossibilité d'observer une saturation non-linéaire ou des avalanches en différent y . Le modèle réduit détermine une première approximation de la densité d'équilibre mais non les hautes fréquences de la dynamique. Enfin, pour que ce modèle réduit soit auto consistant, il faudrait pouvoir prévoir $D_{eff}(t)$ et $V_{eff}(t)$ à partir de la variable $N(t)$ qui décrit la totalité du système. Au lieu d'utiliser un modèle de prédiction pour les poids $D_{eff}(t)$ et $V_{eff}(t)$, il est possible d'utiliser simplement les valeurs moyennes de $\langle D_{eff}(t) \rangle_t$ et $\langle V_{eff}(t) \rangle_t$. Cette seconde approche nécessite une phase d'entraînement du modèle pour estimer les deux coefficients. La figure 3.24 illustre l'impact des valeurs D et ν utilisées dans des simulations TOKAM2D vis à vis des coefficients D_{eff} et V_{eff} du modèle réduit. Les variations de D_{eff} et V_{eff} indiquent qu'une part variable du transport turbulent est capté sous forme d'un transport diffusif et convectif.

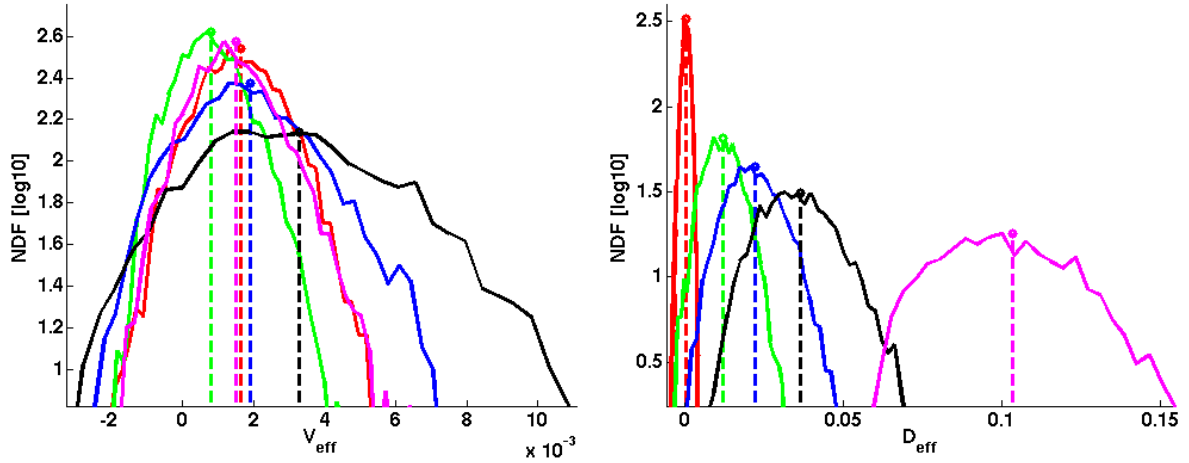
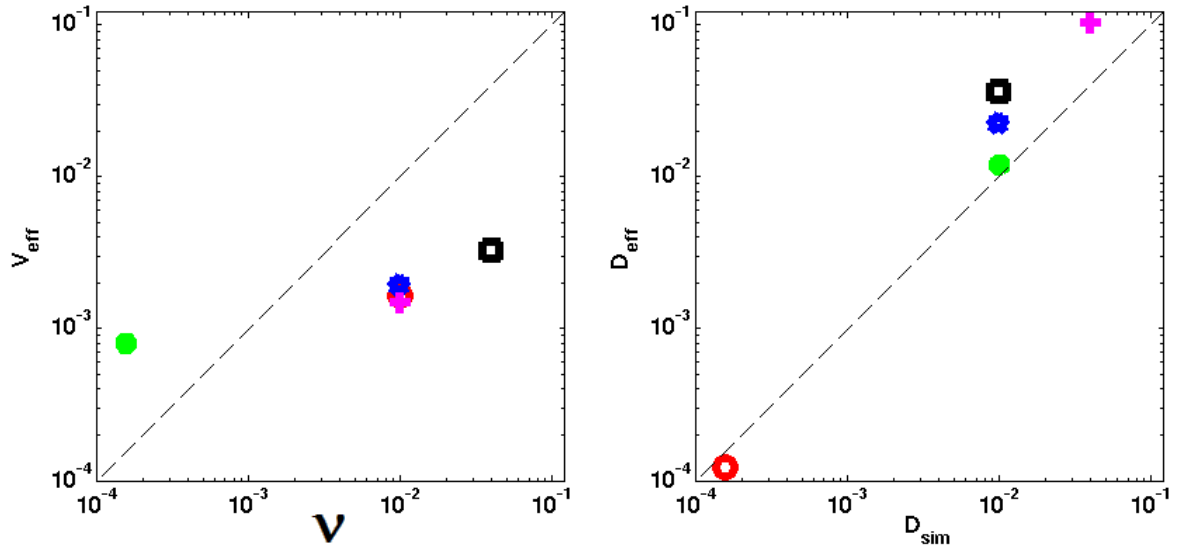
(a) Densité de probabilité du poids $V_{eff}(t)$.(b) Densité de probabilité du poids $D_{eff}(t)$.(c) Dépendance de $V_{eff}(t)$ vis-à-vis de ν .(d) Dépendance de $D_{eff}(t)$ vis-à-vis de D .

FIGURE 3.24 – Comparaison de 5 simulations : $(D, \nu) = (10^{-2}, 10^{-2})$ (courbe bleue), $(4 \times 10^{-2}, 10^{-2})$ (violet), $(10^{-2}, 4 \times 10^{-2})$ (noire), $(1.5 \times 10^{-2}, 10^{-4})$ (rouge) et $(10^{-2}, 1.5 \times 10^{-2})$ (verte). Les droites hachurées '-' reportent la valeur moyenne de chaque densité de probabilité. Une corrélation est observée entre la valeur de D dans la simulation de TOKAM2D et le $\langle D_{eff} \rangle_t$ du modèle réduit. Une corrélation similaire est observée entre ν et $\langle V_{eff} \rangle_t$.

3.4.2.2 Poids variables en x

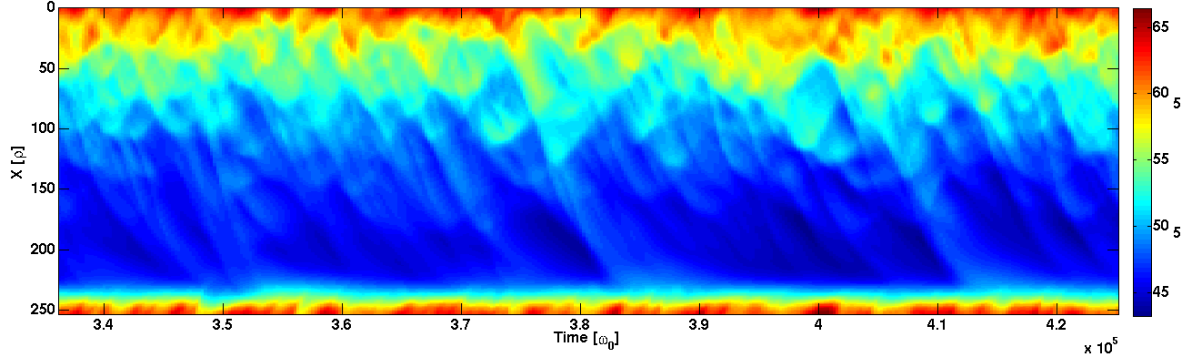
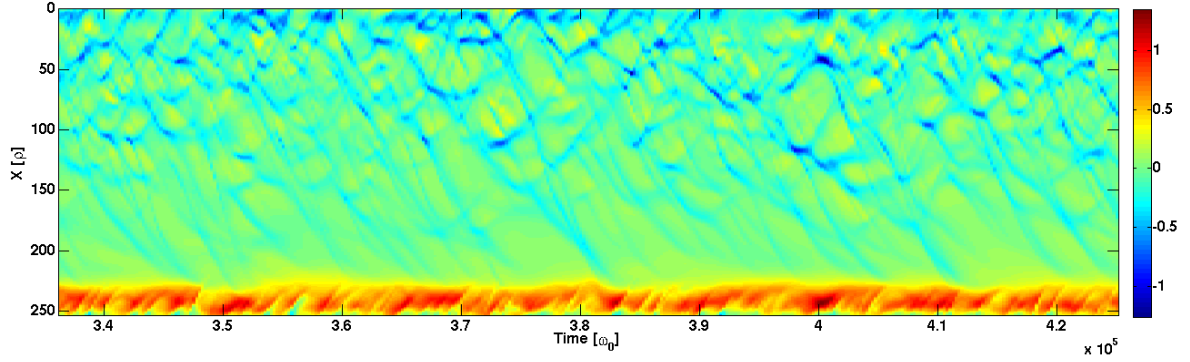
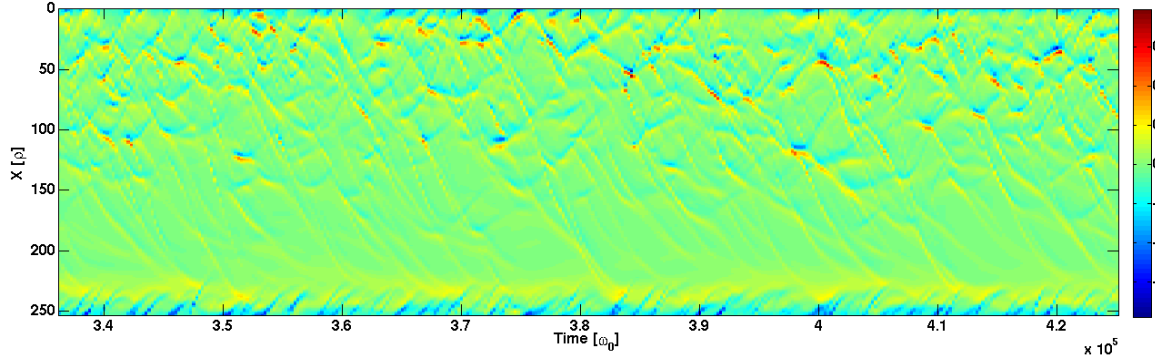
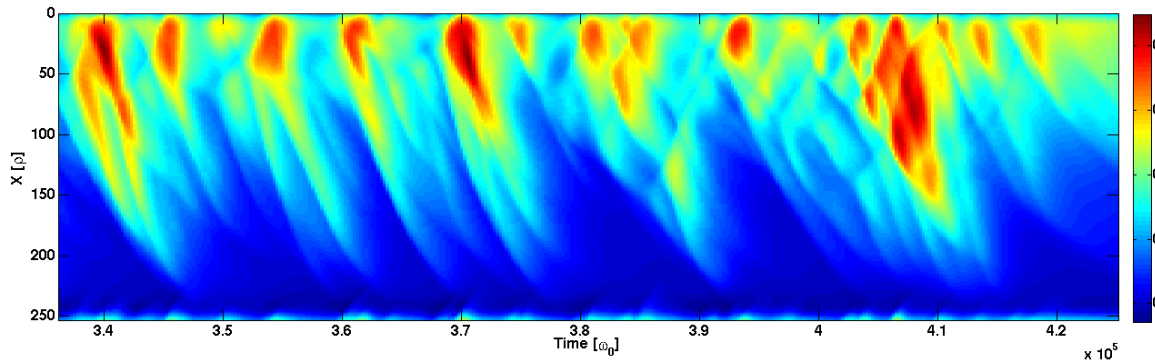
Pour récupérer une partie plus importante de la dynamique, une dépendance en x des coefficients $V_{eff}(x, t)$ et $D_{eff}(x, t)$ est introduite.

$$\begin{aligned} \partial_t N &= -[\phi, N] + D\Delta N - \sigma N e^{\Lambda-\phi} + S \\ \partial_t N &= -\nabla \cdot (\Gamma_T + \Gamma_D) - \sigma N e^{\Lambda-\phi} + S \\ < (\Gamma_T + \Gamma_D) >_y &= -V_{eff}(x, t)n - D_{eff}(x, t)\partial_x n + \varepsilon \end{aligned} \quad (3.44)$$

Les différents opérateurs présents dans l'équation eq.(3.44) sont illustrés figure 3.25. La dynamique des $D_{eff}(x, t)$ et $V_{eff}(x, t)$ est extrêmement structurée (voir Fig. 3.26). La coloration de ces images est optimisée pour voir le maximum de détails sans être ébloui par les valeurs maximales et minimales prises par $D_{eff}(x, t)$ et $V_{eff}(x, t)$. Dans les deux champs, de nombreuses discontinuités sont observées : passage d'un minimum à un maximum en un pixel. Ce premier point rend difficile la prédiction des D_{eff} et V_{eff} et oblitère la simplicité formelle de l'équation réduite. Il convient également de remarquer la présence de nombreuses valeurs négatives dans le champ de diffusion effective. Ces deux points nous font dire qu'un modèle de diffusion - convection détaillé jusqu'à la résolution de l'équation de transport, donc sans perte d'information, n'est pas en accord avec les principes thermodynamiques.

Une réduction similaire, mais avec une perte d'information, consiste à supposer D_{eff} et V_{eff} constants par morceau le long du profil. Pour fixer localement ces deux inconnues, il est nécessaire de disposer de deux équations ou plus. Ainsi, un nombre n_x de systèmes utilisant $N_x/n_x \geq 2$ points sont résolus. Lorsque $n_x = 1$, il n'y a qu'un système linéaire à résoudre de taille N_x donc aucune dépendance en x n'est exploitée : le modèle est équivalent au modèle eq.(3.43). Lorsque $n_x = N_x/2$, le nombre d'inconnues de chaque système est égal au nombre d'équations de chaque système, cette approche permet de garantir une erreur ε de l'ordre de la précision numérique car le système est carré. La figure 3.27 illustre l'erreur relative r telle que $r_i = \|\varepsilon\|_i / \|RHS\|_i$ où ε est l'écart entre la prédiction du modèle réduit et l'information de dynamique à capturer baptisée RHS (car c'est le "membre de droite" du système linéaire résolu dans PoPe). Comme prévu, la réduction utilisant $n_x = 2^7$ valeurs de D_{eff} et de V_{eff} permet un erreur relative de l'ordre de la précision de la machine. Le passage à une valeur inférieure de n_x entraîne une forte augmentation de l'erreur relative pour atteindre l'ordre de 1% en norme 1. Le dernier enseignement se situe dans le zoom sur $n_x = 2^0$ où les différents modèles eq.(3.44 ('o'), eq.(3.43) ('*') et eq.(3.40) sont comparés. L'erreur du modèle prenant en compte la source et le puits est supérieure à l'erreur du modèle les négligeant. Mais pour un nombre de degrés de liberté équivalents, l'erreur est minimale lorsque la dynamique visée est un flux et non directement le crochet de Poisson.

Enrichir le modèle en utilisant des dérivées non entières ou différencier les modes de Fourier au lieu de différencier les positions en x n'a pas entraîné une diminution significative de l'erreur ou une compréhension plus poussée de la turbulence.

(a) $n(x, t) = \langle N(x, y, t) \rangle_y$.(b) $\partial_x n(x, t) = \langle \partial_x N(x, y, t) \rangle_y$.(c) $\partial_x^2 n(x, t) = \langle \partial_x^2 N(x, y, t) \rangle_y$.(d) $\Gamma_T(x, t) + \Gamma_D(x, t) = \langle -N(x, y, t) \partial_y \phi(x, y, t) \rangle_y + \langle -D \partial_x N(x, y, t) \rangle_y$.FIGURE 3.25 – Illustrations dans le plan (x, t) des termes de l'équation eq.(3.44) mesurés dans une simulation TOKAM 2D standard (type S1, voir tab. 2.1).

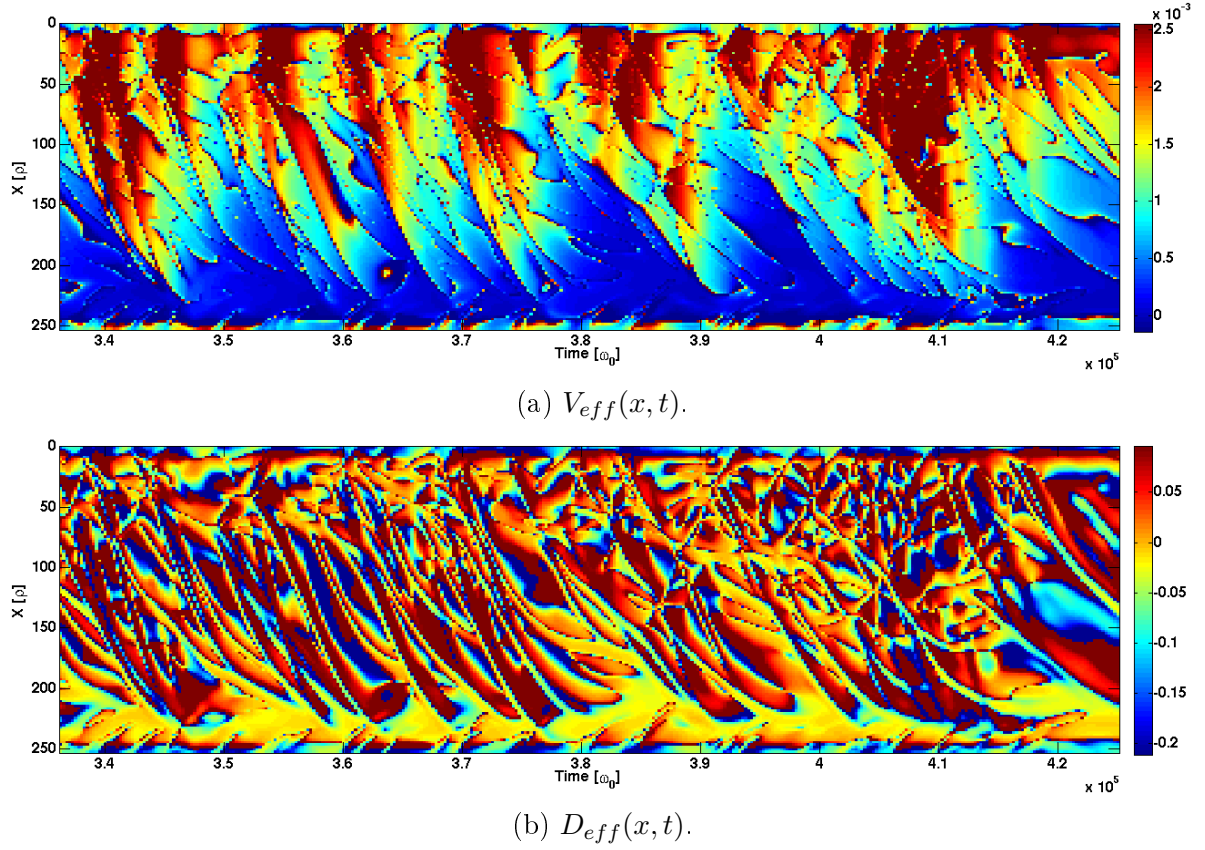


FIGURE 3.26 – Illustration dans le plan (x, t) des coefficients déterminés par PoPe pour l'équation eq.(3.44) dans une simulation de TOKAM2D standard (type S1, voir tab. 2.1). L'échelle des couleurs est choisie pour distinguer de façon optimale les différentes structures. Les valeurs maximale et minimale des deux champs peuvent diverger localement.

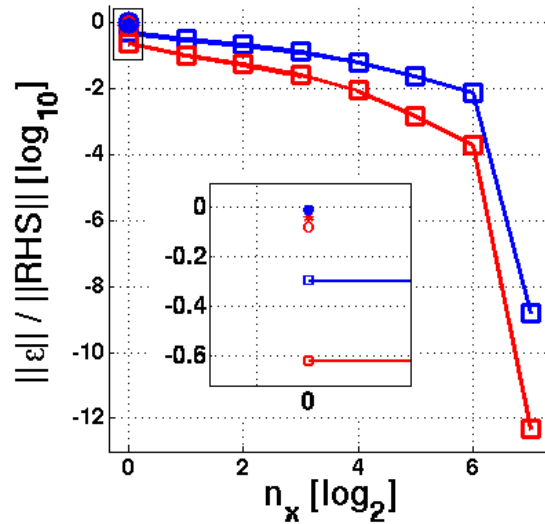


FIGURE 3.27 – Erreur du modèle réduit ε par rapport à la dynamique du modèle complet RHS en fonction du nombre de degrés de liberté utilisé dans les profils V_{eff} et D_{eff} . Courbes bleues : norme 1, courbes rouges : norme 2. Symbole carré ('□') : modèle eq.(3.44), symbole cercle ('o') : modèle eq.(3.43), symbole étoile ('*') : modèle eq.(3.40).

3.4.3 Réduction par dégradation du maillage de TOKAM2D

Alors que le nombre de degrés de liberté utilisés pour décrire l'état du système dans une simulation de TOKAM2D s'élève à $2 \times N_x \times N_y$, le modèle proie-prédateur n'en compte que 2 (voire 3 en utilisant deux prédateurs) et les modèles diffusion - convection n'en utilisent que N_x pour la variable $N(x) = \langle N(x, y) \rangle_y$. Sur le fond, la réduction est une perte pour un gain. Il faut donc toujours placer la réduction dans un contexte : quel est mon objectif ? Garder un maillage à deux dimensions et les équations complètes mais réduire la résolution peut donner une information déjà très complète et permettre le couplage d'un module de turbulence (Large Eddy Simulation (LES) ou Direct Numerical Simulation (DNS)) à un code de transport (Reynolds-averaged Navier-Stokes equations (RANS)). Pour de nombreuses méthodes numériques, une résolution minimale est nécessaire pour que le calcul des opérateurs du modèle soit précis, en particulier pour l'estimation des dérivées par des méthodes de différences finies. Dans le cas de TOKAM2D, l'approche pseudo-spectrale alliée à un filtre d'anti-aliasing contourne ce problème.

Pour comparer la dynamique de systèmes sous-résolus et correctement résolus, j'utilise les densités de probabilité du flux turbulent moyenné en y (Fig. 3.28a et Fig. 3.28b), le flux diffusif moyenné en y (Fig. 3.28c) et la dérivée temporelle de la densité moyennée en y (Fig. 3.28d). Ces différentes mesures permettent de caractériser le temps passé par le système dans différents états ainsi que la dynamique liant ces états. Les simulations réalisées sur les maillages 256×256 , 128×128 et 64×64 ont des comportements tout à fait similaires selon les mesures réalisées (Fig. 3.28). Le champ de densité $N(x, y)$ des simulations 256×256 et 64×64 est représenté figure 3.29. Bien que le maillage le plus grossier semble insuffisant pour décrire finement les structures, le comportement des systèmes mesurés par les densités de probabilité (Fig. 3.28) semble tout à fait similaire. Pour obtenir un comportement proche en terme de moyenne et d'écart-type du flux turbulent moyenné en y , un maillage 32×32 rend déjà avec une bonne précision les résultats du maillage complet, la perte est de 10% avec le maillage 32×32 et de 2% avec le maillage 64×64 par rapport à la simulation la mieux résolue (256×256). Cette mesure de l'erreur correspond à l'étude de l'erreur ε_Φ , la partie de la dynamique que l'on ne peut pas modéliser. Enfin, un trop faible nombre de degrés de liberté peut entraîner la perte de la turbulence, figure 3.13. Pour les paramètres physiques standards considérés, un maillage de 8×8 points ne permet pas de faire apparaître de turbulence, il est nécessaire d'utiliser un maillage de 16×16 points au minimum. Ceci se comprend en étudiant la stabilité des modes présents dans le système (voir Fig. 3.30). Il est nécessaire d'avoir une population de modes évanescents suffisamment grande pour que la non-linéarité de la turbulence puisse s'exprimer.

En contrepartie de l'erreur commise sur la dynamique, deux autres éléments sont à prendre en considération pour faire un choix judicieux de maillage. Le premier élément est que le gain en temps de calcul et en occupation mémoire s'élève à un facteur $\times 16$ (respectivement $\times 64$) pour le maillage 64×64 (32×32) par rapport au maillage 256×256 . Un code prenant en compte des dimensions supplémentaires aurait un gain

plus important encore. Accepter une précision moindre sur chaque simulation permet de multiplier le nombre de simulations disponibles à budget de calcul constant. Le second élément est la nécessité de mettre en perspective l'ensemble des hypothèses analytiques qui ont conduit à l'établissement du modèle et aux choix des valeurs numériques utilisées pour les paramètres par rapport aux erreurs numériques mesurées. En effet, certains paramètres comme la dissipation D ou la viscosité ν impactent fortement la dynamique du système, potentiellement plus que l'erreur numérique, en particulier pour certaines valeurs critiques, cependant leur estimation reste difficile. Ce second argument penche aussi pour la mise en place d'études de propagation d'incertitudes pour s'assurer de la robustesse de tout résultat.

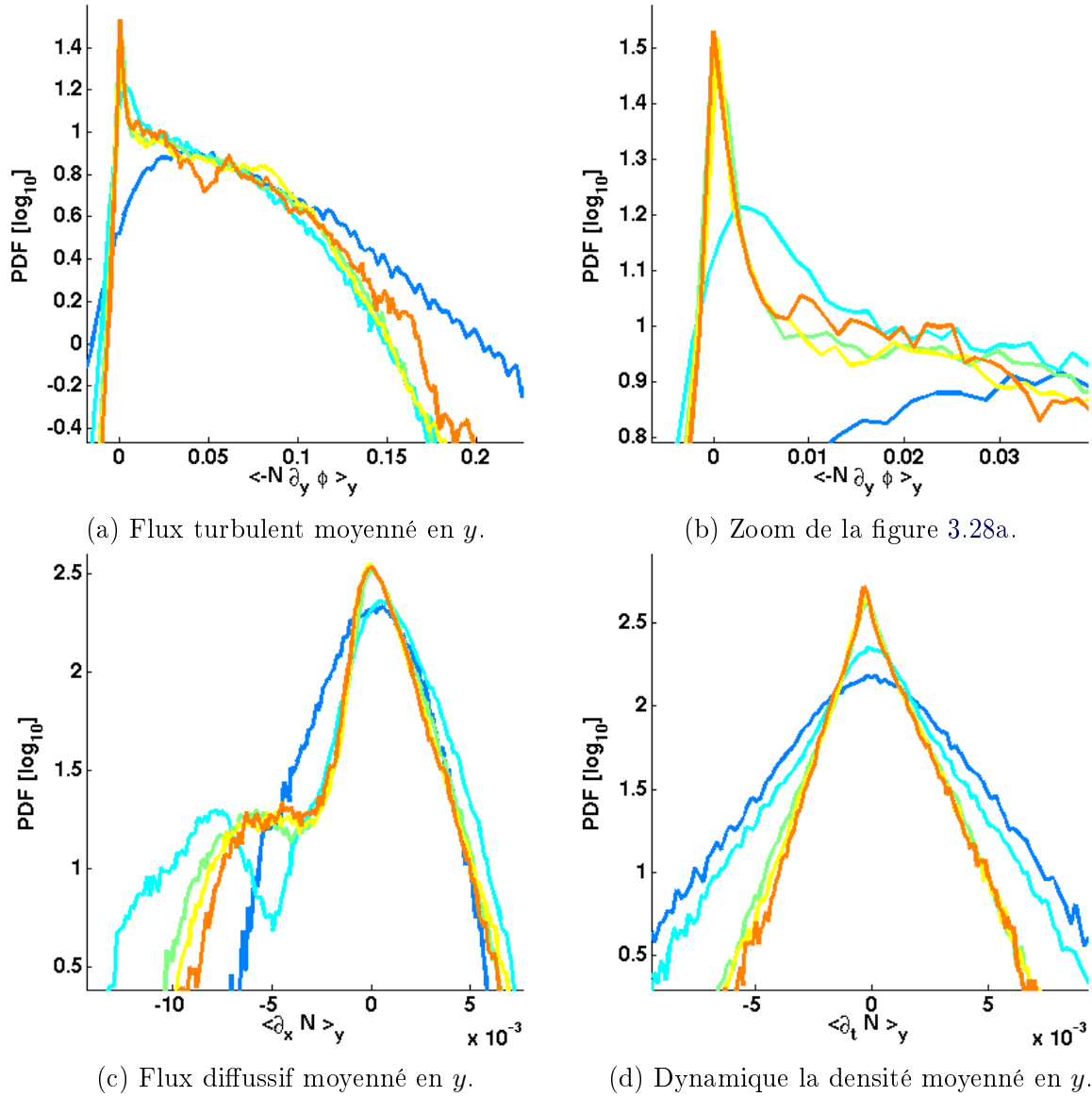
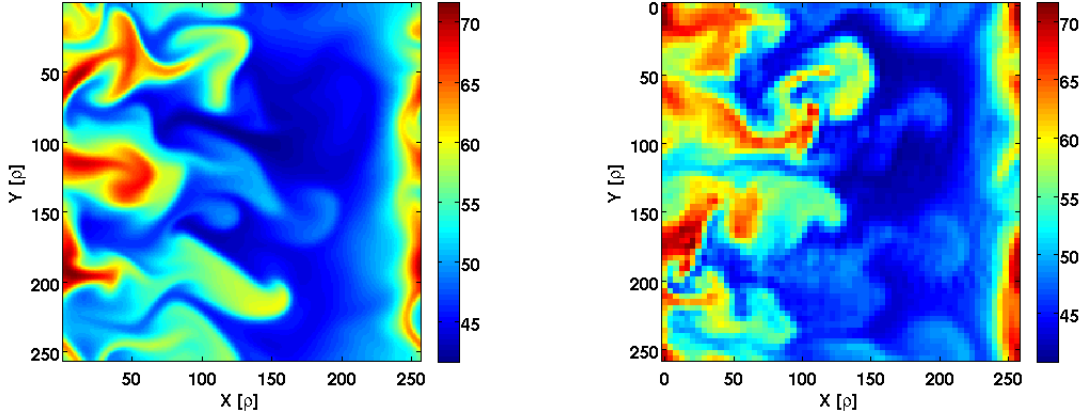
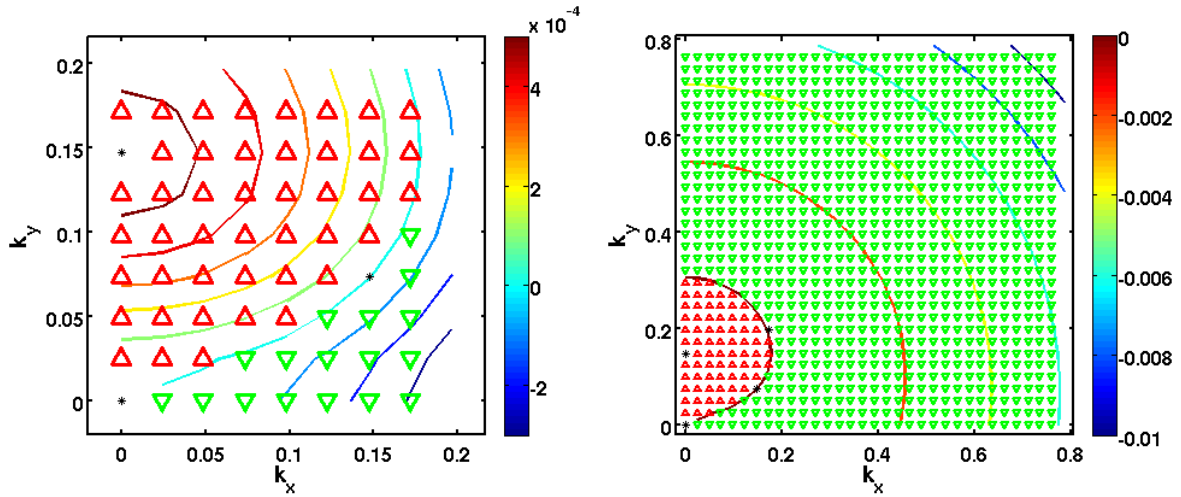


FIGURE 3.28 – Différentes densités de probabilité décrivant le transport turbulent d'une simulation de TOKAM2D standard (type S1, voir tab. 2.1). Courbes oranges = 256×256 , courbes jaunes = 128, courbes vertes = 64, courbes cyans = 32, courbes bleues = 16.



(a) Densité d'une simulation S1 en 256×256 . (b) Densité d'une simulation S1 en 64×64 .

FIGURE 3.29 – Illustration du champ de densité de deux simulations TOKAM2D standards (type S1, voir tab. 2.1). La simulation Fig. 3.29b semble sous-résolue, pourtant les comportements des flux turbulents des deux simulations sont tout à fait comparables Fig. 3.28.



(a) Stabilité des modes d'un maillage 8×8 . (b) Stabilité des modes d'un maillage 32×32 .

FIGURE 3.30 – Taux de croissance en fonction du nombre d'onde pour une simulation standard (type S1, voir tab. 2.1). La longueur de gradient utilisée est celle obtenue à partir des simulations non linéaires convergées. Seulement un tiers des modes du maillage 8×8 sont évanescents et la totalité des modes instables n'est pas prise en compte. Moins d'un huitième des modes du maillage 32×32 sont instables : tous sont pris en compte. Légende commune avec la figure 3.2.

TERESA : outil de simulation d'un modèle minimal de turbulence gyro-cinétique

Sommaire

4.1	Modèle de la dynamique des particules piégées	94
4.1.1	Modélisation de la turbulence basse fréquence	94
4.1.2	Équation de Vlasov des ions piégés : géométrie $4D$	97
4.1.3	Équilibre Maxwellien et forçage du système	97
4.1.4	Équation de quasi-neutralité $2D$: influence des particules passantes	98
4.1.5	Étude linéaire du système : modes globaux instables	100
4.2	Code TERESA : Semi-Lagrangien & HPC	102
4.2.1	Vlasov $2 + 2D$ Semi-Lagrangien : décomposition de domaine	102
4.2.2	Champ d'advection issu de la quasi-neutralité $2D$	108
4.2.3	Environnement HPC du code TERESA	111
4.3	Vérification du code TERESA par la méthode PoPe	113
4.3.1	Vérification de la quasi-neutralité en régimes réalistes	113
4.3.2	Vérification de Vlasov : disparition des petites échelles	115

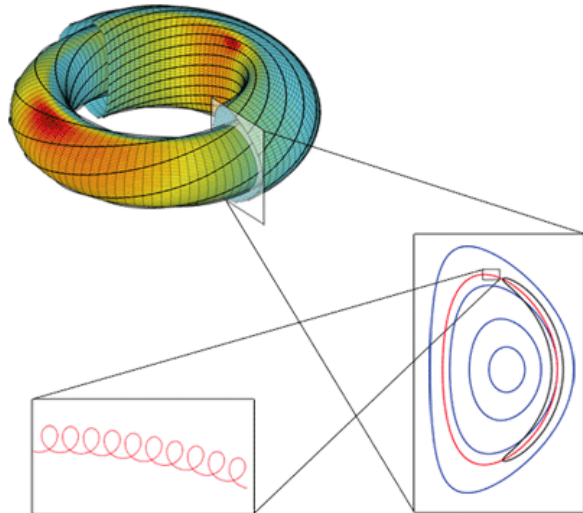
4.1 Modèle de la dynamique des particules piégées

TERESA, pour "Trapped Element REduction in Semi-Lagrangian Approach", est un modèle minimal de la turbulence électrostatique cinétique qui décrit la dynamique des particules piégées d'un tokamak [Kadomtsev 1970]. La première partie de ce chapitre décrit les hypothèses conduisant à la définition du modèle de particules piégées. La deuxième partie décrit les méthodes numériques utilisées et leur implémentation dans une perspective de High Performance Computing (HPC). La dernière partie est consacrée à la vérification du code TERESA en utilisant la méthode PoPe.

4.1.1 Modélisation de la turbulence basse fréquence

En physique des plasmas chauds réalisés dans les tokamaks, l'approche cinétique est justifiée par la longueur du libre parcours moyen qui est de l'ordre de la taille de la machine. Ainsi, le milieu n'est pas considéré comme à l'équilibre thermodynamique local, une approche fluide basée sur un faible nombre de moments n'est alors pas adaptée pour représenter la richesse d'un tel système. Le fort champ magnétique des tokamaks contraint les particules chargées du plasma à deux types de trajectoires dites «passantes» ou «piégées» (voir Fig. 4.1). Les particules passantes explorent l'intérieur et l'extérieur du tore, les particules piégées se déplacent essentiellement dans la partie extérieure où le champ magnétique est le plus faible (Low Field Side : LFS). Elles sont "piégées" par la variation du champ magnétique en θ qui les confine au LFS. Le mouvement rapide de gyration des particules autour d'une ligne de champ est approximativement un cercle de rayon $\rho_{c,s} = \frac{m_s v_\perp}{e Z_s B}$ avec v_\perp la vitesse de la particule perpendiculairement aux lignes de champ. Le mouvement de rebond des particules piégées rappelle la forme d'une banane dont l'épaisseur dans le plan équatorial est $\delta_{b,s} = \rho_{c,s} q_0 / \sqrt{\varepsilon}$ avec q_0 le facteur de sécurité dans le plan équatorial et ε l'inverse du rapport d'aspect défini par le rapport du petit rayon du tore a et du grand rayon R_0 tel que $\varepsilon = a/R_0$.

FIGURE 4.1 – Emboîtement des surfaces magnétiques toroïdales elliptiques d'un tokamak (en haut à gauche). Coupe des surfaces magnétiques (courbes bleues), trajectoire "banane" d'une particule piégée (noire) et trajectoire d'une particule passante (rouge) (en bas à droite). Zoom sur le mouvement de gyration des particules autour des lignes de champ (en bas à gauche). Source : L. Villard.



L'utilisation d'un modèle de particules piégées correspond à un compromis entre deux contraintes : d'une part la modélisation de la turbulence plasma en utilisant une approche cinétique premier principe et, d'autre part, le coût en puissance de calcul des modèles cinétiques. La gamme de fréquences $\sim \omega$ qui correspond aux instabilités d'ions piégés est telle que, pour une espèce s donnée, $\omega \sim \omega_{d,s} \ll \omega_{b,s} \ll \omega_{c,s}$ où $\omega_{c,s}$ est la fréquence cyclotronique, $\omega_{b,s}$ la fréquence de rebond des particules piégées et ω_d la fréquence de précession toroïdale de ces particules.

$$\omega_{c,s} = eZ_s B / m_s; \quad (4.1)$$

$$\omega_{b,s} = \frac{\sqrt{2E/m_s}}{q_0 R_0} \bar{\omega}_b; \quad \bar{\omega}_b = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{2\mathcal{K}(\kappa^2)} \quad (4.2)$$

$$\omega_{d,s} = \frac{q_0}{a} \frac{E}{eZ_s B_{min} R_0} \bar{\omega}_d; \quad \bar{\omega}_d = 2 \frac{\mathcal{E}(\kappa^2)}{\mathcal{K}(\kappa^2)} - 1 + 4s_0 \left(\frac{\mathcal{E}(\kappa^2)}{\mathcal{K}(\kappa^2)} + \kappa^2 - 1 \right) \quad (4.3)$$

Avec la charge eZ_s , la masse m_s , l'énergie de la particule E , l'intensité du champ magnétique B , le minimum de l'intensité du champ magnétique B_{min} (dans le plan équatorial coté externe), le cisaillement magnétique à l'équateur s_0 , l'angle de pincement $\kappa^2 = \sin(\theta_{v_{g||}}/2)^2$, $\theta_{v_{g||}=0}$ l'angle de rebroussement des particules piégées et $v_{g||}$ la vitesse du centre guide des particules dans la direction parallèle aux lignes de champ, et les intégrales elliptiques complètes du premier et second type \mathcal{E} et \mathcal{K} . Des estimations numériques de ces différentes fréquences pour un Tokamak comme Tore Supra sont reportées dans le tableau tab. 4.1. Pour les particules passantes, la fréquence de rebond ω_b est remplacée par une fréquence «poloidale» ω_{polo} et la fréquence de précession ω_d est remplacée par une fréquence «toroïdale» ω_{toro} . Ainsi la dynamique des particules piégées qui se situe à $\sim \omega_d$ est largement inférieure aux autres fréquences du système. Cette relation d'ordre entre les différentes fréquences caractérisant la trajectoire d'une particule permet d'utiliser une moyenne sur les mouvements cyclotroniques pour réduire l'approche cinétique à 6 dimensions à une approche gyro-cinétique à 5 dimensions [Brizard 2007] où la particule n'est plus repérée par sa position mais par le centre de son mouvement cyclotronique. Une moyenne comparable peut être effectuée sur les mouvements de rebond pour obtenir un modèle dit «modèle rebond» à 4 dimensions. La fréquence de rebond n'étant définie que pour les particules piégées, ce type de modèle n'est pas adapté aux particules passantes. La gyro-moyenne et la moyenne-rebond sont supposées avoir un impact minimal sur la dynamique de la turbulence. L'expression analytique de cette "moyenne sur le temps de rebond" est un produit de fonctions de Bessel tenant compte des deux échelles caractéristiques $\rho_{c,s}$ et $\delta_{b,s}$: $\mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}$. L'application de cet opérateur sur un champ quelconque x est notée $\mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}(x) = \bar{x}$. Lorsque la gyro-moyenne impose l'utilisation d'une fonction de distribution de centre guide dans l'approche gyro-cinétique, par rapport à une fonction de distribution de particules dans l'approche cinétique, l'approche moyenne sur le temps de rebond impose l'utilisation d'un label «centre de banane» qui est généralement pris au niveau du plan équatorial, au milieu de la banane. Un autre atout de ce modèle est le fait que ω_d ne dépend pas de la masse des particules ($\omega_{d,electron} = \omega_{d,proton}$), ceci permet de modéliser des électrons et des ions avec un coût comparable dans les deux cas.

	ω_c [Hz]	ω_{polo} [Hz]	ω_{toro} [Hz]	ω_b [Hz]	ω_d [Hz]	ρ_c [m]	δ_b [m]
Électron	1.1×10^{11}	5.1×10^5	1.6×10^6	1.8×10^5	60	2.7×10^{-5}	1.6×10^{-4}
Proton	6.1×10^7	1.2×10^4	3.4×10^4	4.1×10^3	60	1.1×10^{-3}	6.8×10^{-3}

TABLE 4.1 – Valeur numérique des paramètres caractérisant la trajectoire de protons et électrons dans un tokamak tel que Tore Supra : petit rayon $r = 0.5$ m, grand rayon $R = 2$ m, température $T = 1$ keV, champ magnétique $B = 4$ T, profil de sécurité $q(r) = 3$. Les fréquences ω_{polo} et ω_{toro} sont adaptées aux particules passantes, les fréquences ω_b et ω_d sont adaptées aux particules piégées. Source : note de cours de Étienne Gravier et Jean-Hugues Chatenet.

Un formalisme angles-actions à 6 dimensions [Garbet] est adapté à la description des trajectoires périodiques des particules dans un tokamak de par la présence dans le système de trois invariants que l'on peut associer à trois angles. Soit les actions J_1 , J_2 et J_3 associées aux angles α_1 , α_2 et α_3 :

$$\vec{J} = \begin{pmatrix} J_1 = -\frac{m_s}{eZ_s}\mu \\ J_2 = \oint \frac{m_s v_{g||}}{2\pi} dw \\ J_3 = M = eZ_s\psi_0 \end{pmatrix} \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 = \omega_{c,s}(\vec{J})t + \alpha_{1,t=0} \\ \alpha_2 = \omega_{b,s}(\vec{J})t + \alpha_{2,t=0} \\ \alpha_3 = \omega_{d,s}(\vec{J})t + \alpha_{3,t=0} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

La moyenne sur les deux mouvements à haute fréquence supprime les dépendances de l'Hamiltonien en fonction des phases rapides α_1 et α_2 , ce qui rend les actions J_1 et J_2 constantes. Le modèle est alors réduit à deux variables conjuguées (ψ_0, α_3) , que l'on nommera (ψ, α) par la suite, et à deux invariants (J_1, J_2) . L'angle α est lié aux angles θ_g et ϕ_g de la description gyro-cinétique usuelle par la relation $\alpha = \phi_g - q_0\theta_g$. L'espace des paramètres qui correspond à l'espace des vitesses de la description cinétique est décrit pour des particules piégées par les variables (κ, E) : une mesure de la profondeur de piégeage et de l'énergie des particules. En se restreignant à un domaine de simulation suffisamment étroit pour éliminer certaines dépendances par rapport au petit rayon et en tenant compte de la perturbation du potentiel électrique Φ , l'hamiltonien des centres-bananes est :

$$\bar{H}(\alpha, \psi, \kappa, E) = E(1 + \omega_{d,s}(\kappa)\psi) + \bar{\Phi}(\alpha, \psi, E) \quad (4.5)$$

Le terme $\bar{\Phi}$ est le terme qui introduit les dépendances en (α, ψ) de l'hamiltonien. De plus, ce terme dépend explicitement de la dimension E car pour des particules à différentes énergies, le rayon de Larmor $\rho_{c,s}$ et la largeur banane $\delta_{b,s}$ changent de taille : $\rho_{c,s} \propto \delta_{b,s} \propto \sqrt{E}$. Cette dépendance a pour effet de lisser le terme $\bar{\Phi}$ pour les particules à haute énergie car elles décrivent de grandes orbites qui, une fois moyennées, ne sont plus influencées que par les grandes structures du potentiel électrique. Du fait, en outre, de l'augmentation du terme de dérive $\omega_{d,s}\psi$, les particules rapides deviennent insensibles aux perturbations locales du potentiel électrique qu'elles traversent trop rapidement, elles ne sont plus sensibles qu'au potentiel électrique moyen. La dépendance en κ de la fréquence de précession $\omega_{d,s}$ peut-être éliminée en se restreignant aux particules fortement piégées $\kappa \rightarrow 0$. Cette hypothèse permet de n'utiliser qu'une seule valeur du paramètre κ et donc de passer d'un problème à quatre dimensions à un problème à trois dimensions.

4.1.2 Équation de Vlasov des ions piégés : géométrie 4D

A partir de l'équation du mouvement d'une particule décrit par l'hamiltonien eq.(4.5), une équation de Vlasov à 4 dimensions est écrite pour la fonction de distribution $\bar{f}_s(\alpha, \psi, \kappa, E)$ décrivant la densité de probabilité de la position d'un centre-banane associée à une particule d'espèce s . Les 4 dimensions sont α l'angle toroïdal, ψ un label de surface de flux, κ un indicateur de profondeur de piégeage et E l'énergie de la particule.

$$\frac{d\bar{f}_s}{dt} = \partial_t \bar{f}_s - [\bar{\Phi}_s, \bar{f}_s] + \omega_{d,s} E \partial_\alpha \bar{f}_s = S_s + D + C_s \quad (4.6)$$

Le crochet de Poisson est défini par $[\bar{\Phi}, \bar{f}] = \partial_\alpha \bar{\Phi} \partial_\psi \bar{f} - \partial_\psi \bar{\Phi} \partial_\alpha \bar{f}$. Le terme source S_s assure le forçage par le flux, le terme d'amortissement D permet la prise en compte de zones tampon et C_s est un terme de perte. Le code TERESA est capable de simuler N espèces cinétiques, ce qui nécessite l'utilisation de N fonctions de distribution. Les variables sont normalisées par les grandeurs caractéristiques relatives aux protons, la normalisation est commune à toutes les espèces : $\hat{t} = \omega_0 t$ pour une fréquence de précession ω_0 typique, $\hat{\psi} = \psi / L_\psi$ pour un domaine de simulation de taille L_ψ , $\hat{E} = E / T_0$ et pour une température typique T_0 et $\hat{\Phi} = \Phi / (\omega_0 L_\psi)$. Par la suite, la notation $\hat{\cdot}$ est omise, l'utilisation des normalisations est implicite.

4.1.3 Équilibre Maxwellien et forçage du système

L'équilibre \bar{f}_{eq} utilisé initialement pour la fonction de distribution des centres-bananes est maxwellien et il ne dépend pas de l'angle α :

$$\bar{f}_{eq}(\psi) = \left(\frac{3}{2}\right)^{3/2} \frac{n_{eq}(\psi)}{T_{eq}(\psi)^{3/2}} e^{-\frac{3}{2} \frac{E}{T_{eq}(\psi)}} \quad (4.7)$$

avec $n_{eq}(\psi)$ et $T_{eq}(\psi)$ des profils de densité et température. Les perturbations utilisées pour déclencher la turbulence dans le modèle sont des bains de modes. Un grand nombre de modes perturbateurs est équivalent à l'utilisation d'un bruit blanc.

Le système modélisé n'est pas fermé, il peut être excité en utilisant des bains thermiques ou un forçage par le flux. Les bains thermiques sont des conditions imposées à \bar{f} sur les bords ($\psi = 0$ et $\psi = L_\psi$), qui imposent la valeur au bord de tous les moments fluides et de la température. L'écart à l'équilibre est alors la différence de température entre les deux bords de la boîte de simulation. Pour permettre le contact thermique entre l'intérieur de la boîte et l'extérieur, une zone tampon est utilisée [Grandgirard 2007]. Cette zone a pour objectif de convertir le transport turbulent en transport diffusif, de façon à garantir une forte régularité de \bar{f} sur les bords et éviter des problèmes numériques. La seconde approche de forçage consiste à imposer la valeur de l'inconnue \bar{f} sur le bord froid de la boîte, le mur externe froid du tokamak (à $\psi = L_\psi$, avec L_ψ la taille de la boîte), mais à imposer une condition de symétrie sur l'autre bord, une condition de Neumann : $\partial_\psi \bar{f} = 0$. Ainsi, le seul flux de chaleur qui peut entrer ou sortir de la boîte se fait par la bord externe ou par l'utilisation de sources et puits dans le domaine de simulation.

La différence entre ces deux approches est fondamentale : imposer la température sur les bords du domaine de simulation ne permet pas d'imposer l'intensité des flux, à l'inverse, imposer un flux nul sur le bord interne ne permet pas d'y imposer la température.

4.1.4 Équation de quasi-neutralité 2D : influence des particules passantes

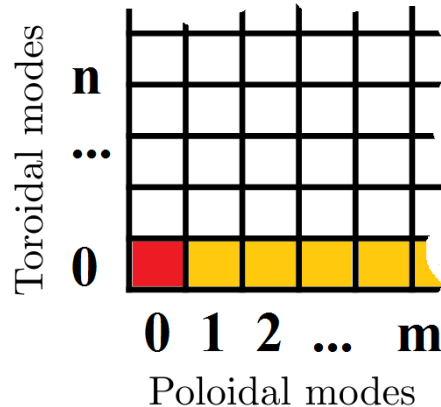
La trajectoire de particules chargées est sensible à la présence d'un potentiel électrique. Les hypothèses de turbulence basse fréquence qui conduisent à l'hamiltonien, eq.(4.5), ne nécessitent pas de décrire le système plus précisément que les échelles spatiales de l'ordre du rayon de Larmor $\rho_{c,s}$ et de la largeur banane $\delta_{b,s}$. Au lieu d'utiliser directement la loi de Maxwell-Gauss liant le potentiel électrique à la densité de charge totale qui est faible aux échelles considérées, des relations liant la densité de charge de chaque espèce et le potentiel électrique sont mises en évidence. Cette approche conduit alors à résoudre le problème d'électroneutralité $\sum_s \rho_s(\Phi) = 0$. Soit $\rho_i(\alpha, \psi) = \sum_i Z_i n_i(\alpha, \psi)$ la densité de charge des ions (définie par la densité de chaque espèce d'ion multipliée par leur charge), et $\rho_e(\alpha, \psi) = -en_e(\alpha, \psi)$ la densité de charge portée par les électrons, alors $\rho_i(\alpha, \psi) + \rho_e(\alpha, \psi) = 0$. Le niveau de turbulence restant faible, les densités de charge des électrons et de la somme des ions sont supposées osciller autour d'une densité d'équilibre $\rho_{eq}(\psi) \simeq \langle |\rho_e| \rangle_\alpha \simeq \sum_i Z_i \langle n_i(\alpha, \psi) \rangle_\alpha$. Cela permet de réécrire l'égalité des charges sous une forme perturbative avant de mettre en évidence un lien entre les perturbations et le potentiel électrique :

$$\frac{\rho_i(\alpha, \psi) - \rho_{eq}(\psi)}{\rho_{eq}} + \frac{\rho_e(\alpha, \psi) - \rho_{eq}(\psi)}{\rho_{eq}(\psi)} = 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{\delta \rho_i(\alpha, \psi)}{\rho_{eq}(\psi)} + \frac{\delta \rho_e(\alpha, \psi)}{\rho_{eq}(\psi)} = 0 \quad (4.9)$$

Lorsque les électrons ne sont pas explicitement décrits par une fonction de distribution, l'hypothèse adiabatique est utilisée pour la relation entre la densité et le potentiel électrique : les électrons sont alors considérés comme toujours à l'équilibre dans le potentiel électrique alors que les ions répondent plus lentement à des oscillations du champ électrique. Cette réponse adiabatique des électrons au champ électrique est aussi utilisée pour décrire la réponse des particules passantes.

FIGURE 4.2 – Uniquement le mode ($m = 0, n = 0$) (en rouge) est supprimé dans la réponse adiabatique d'un modèle gyro-cinétique. Les modes ($m \neq 0, n = 0$) (en orange) sont supprimés dans la réponse adiabatique d'un modèle rebond car ils sont indiscernables du mode ($m = 0, n = 0$).



Une fois linéarisée, la réponse adiabatique prend la forme suivante :

$$\frac{\delta\rho_s}{\rho_{eq}} = eZ_s(\Phi - \langle \Phi \rangle_{\theta_g, \phi_g}) \quad (4.10)$$

Avec $\langle \rangle_{\theta_g, \phi_g}$ la moyenne sur une surface magnétique. Le plan que décrivent les angles poloidaux et toroidal de l'approche gyro-cinétique (θ_g, ϕ_g) étant réduit à l'unique dimension $\alpha = \phi_g - q_0\theta_g$ dans le modèle de TERESA, il n'est pas possible d'isoler le mode $k_{\theta=0}, k_{\phi=0}$ des autres modes du potentiel électrique (voir Fig. 4.2). L'impossibilité de distinguer ce mode des modes $(m \neq 0, n = 0)$ dans un modèle rebond justifie l'introduction d'un paramètre λ modulant la réponse adiabatique :

$$\frac{\delta\rho_s}{\rho_{eq}} = eZ_s(\Phi - \lambda \langle \Phi \rangle_\alpha) \quad (4.11)$$

La détermination de la densité des espèces cinétiques passe par l'intégration dans l'espace des vitesses des fonctions de distribution. Les fonctions de distribution décrivent des probabilités de présence de centres-bananes ; elles ne décrivent pas directement la probabilité de présence d'une particule. Cependant, pour résoudre l'équation de quasi-neutralité, il est nécessaire de connaître la position des charges dans l'espace de façon précise. Pour passer d'une description de centres-bananes à une description de particules, il est nécessaire de faire appel à l'opérateur de moyenne $\mathcal{J}_{0, \rho_{c,s}, \delta_{b,s}}$ à deux reprises afin d'établir le changement de position entre les centres-bananes et la position réelle des particules dans l'espace. La linéarisation de cette étape introduit une densité de polarisation sous la forme $\Delta_{\rho_{c,s}, \delta_{b,s}} \Phi$ avec $\Delta_{\rho_{c,s}, \delta_{b,s}} = \rho_{c,s}^2 \partial_\alpha^2 + \delta_{b,s}^2 \partial_\psi^2$ un opérateur tenant compte des tailles finies du rayon de Larmor et de la largeur banane. L'intégration de l'espace des vitesses nécessite la définition d'un élément de volume $d^3\alpha d^3J = \frac{2}{\sqrt{\pi}} j_\kappa(\kappa) d\kappa j_E(E) dE$ avec $j_\kappa(\kappa) = \mathcal{K}(\kappa)\kappa$ le jacobien dans la dimension κ et $\mathcal{K}(\kappa)$ l'intégrale elliptique complète du second type, $j_E(E) = E^{1/2}$ le jacobien dans la dimension E . Soit $n_s(\alpha, \psi)$ la densité obtenue par intégration d'une fonction de distribution f_s décrivant une population de particules piégées :

$$n_s(\alpha, \psi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \mathcal{J}_{0, \rho_{c,s}, \delta_{b,s}} \bar{f}_s + C_i n_{eq}(\psi) \Delta_{\rho_{c,s}, \delta_{b,s}} \Phi \quad (4.12)$$

Finalement, la version la plus simple de l'équation de quasi-neutralité, pour une espèce cinétique ionique et des électrons cinétiques en tenant compte des particules passantes sous forme adiabatique s'écrit :

$$\begin{aligned} -\frac{\delta\rho_e(\alpha, \psi)}{\rho_{eq}(\psi)} &= \frac{\delta\rho_i(\alpha, \psi)}{\rho_{eq}(\psi)} \\ C_e(\Phi - \lambda \langle \Phi \rangle_\alpha) &= \frac{2}{\sqrt{\pi} n_{eq}(\psi)} \int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \bar{f} - 1 + C_i \Delta_{\rho_c, \delta_b} \Phi \\ C_e(\Phi - \lambda \langle \Phi \rangle_\alpha) - C_i \Delta_{\rho_c, \delta_b} \Phi &= \frac{2}{\sqrt{\pi} n_{eq}(\psi)} \int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \bar{f} - 1 \end{aligned} \quad (4.13)$$

Avec $C_e = (1 + T_i/T_e)/f_p$ et $C_i = C_e f_p T_e/T_i$, utilisant T_i la température caractérisant la population d'ions et T_e la température caractérisant la populations d'électrons, $f_p = 2\sqrt{2\varepsilon}/\pi$ la fraction de particules piégées. La version à 2 espèces (ions et électrons) cinétiques de la quasi-neutralité s'écrit, avec $C_{pol} = 1/T_i$ et $C_{ad} = C_{pol}(1 + T_i/T_e)(1 - f_p)/f_p$ [Drouot 2014b] :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{T_i} (C_{ad}(\Phi - \lambda \langle \Phi \rangle_\alpha) - C_{pol}(\Delta_{\rho_{c,i},\delta_{b,i}} + T_i/T_e \Delta_{\rho_{c,e},\delta_{b,e}})\Phi) = \\ & \frac{2}{\sqrt{\pi}n_{eq}(\psi)} \left(\int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \bar{f}_i - \int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \bar{f}_e \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

4.1.5 Étude linéaire du système : modes globaux instables

L'étude linéaire du système composé d'ions cinétiques et d'électrons adiabatiques permet de mettre en évidence la nature stable ou évanescence de toute perturbation associée à un équilibre. Soit la décomposition équilibre - fluctuations suivante :

$$\bar{f} = \bar{f}_{eq} + \delta\bar{f} \quad ; \quad \bar{f}_{eq} = \langle \bar{f} \rangle_\alpha \quad (4.15)$$

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi}_{eq} + \delta\bar{\Phi} \quad ; \quad \bar{\Phi}_{eq} = \langle \bar{\Phi} \rangle_\alpha = 0 \quad (4.16)$$

Les fluctuations sont décomposées dans l'espace de Fourier tel que :

$$\delta\bar{f} = \sum_{n,k} \hat{f}_{n,k} e^{i(n\alpha + k\psi - \omega t)} \quad (4.17)$$

$$\bar{\Phi} = \sum_{n,k} \hat{\Phi}_{n,k} e^{i(n\alpha + k\psi - \omega t)} \quad (4.18)$$

Les équations de Vlasov et quasi-neutralité linéarisées et réécrites dans l'espace de Fourier sont, pour chacun des modes $n \neq 0$:

$$\hat{f}_n = \frac{(A_n/\omega_d) + (A_T/\omega_d)(\zeta - 3/2)}{\zeta - x - i0^+} \frac{\bar{f}_{eq}}{T_{eq}} J_n \hat{\Phi}_n \quad (4.19)$$

$$C_n \hat{\Phi}_n = \frac{T_{eq}^{5/2}}{n_{eq}} \int J_n \hat{f}_n \zeta^{1/2} d\zeta \quad (4.20)$$

Avec $C_n = (\sqrt{\pi}/2)(C_e + C_i(n^2\rho_c^2 + k^2\delta_b^2))T_{eq}$ le poids de chaque mode dans l'équation de quasi-neutralité, $\zeta = E/T_{eq}$ la normalisation de l'énergie par rapport au profil de température d'équilibre de la fonction de distribution (avec l'hypothèse implicite de séparation d'échelle en ψ : $k_{eq} \ll k_\delta$, k_δ le nombre d'onde de la perturbation), $x = \omega/(nT_{eq}\omega_d)$ la normalisation de la fréquence caractéristique par rapport aux grandeurs du système, $A_{n,T} = d\log(n_{eq}, T_{eq})/d\psi$ les longueurs de gradients normalisés de température et densité d'équilibre et $J_n = \zeta_\alpha \zeta_\psi / ((\zeta + \zeta_\alpha)(\zeta + \zeta_\psi))$ l'opérateur de moyenne dans l'espace de Fourier faisant appel à $\zeta_\alpha = 4/(n^2\rho_c^2 T_{eq})$ et $\zeta_\psi = 4/(k^2\delta_b^2 T_{eq})$.

La relation de dispersion $\mathcal{D}(\omega)$ s'écrit alors :

$$\mathcal{D}(\omega) \equiv C_n - \int_0^\infty \frac{(A_n/\omega_d) + (A_T/\omega_d)(\zeta - 3/2)}{\zeta - x - i0^+} \frac{\bar{f}_{eq}}{T_{eq}} J_n^2 e^{-\zeta} \zeta^{1/2} d\zeta \quad (4.21)$$

Ce système présente de deux branches, deux courbes définissant les seuils d'instabilités dans le plan (A_n, A_T) (voir Fig. 4.3 et voir [Sarazin 2005] pour le détail).

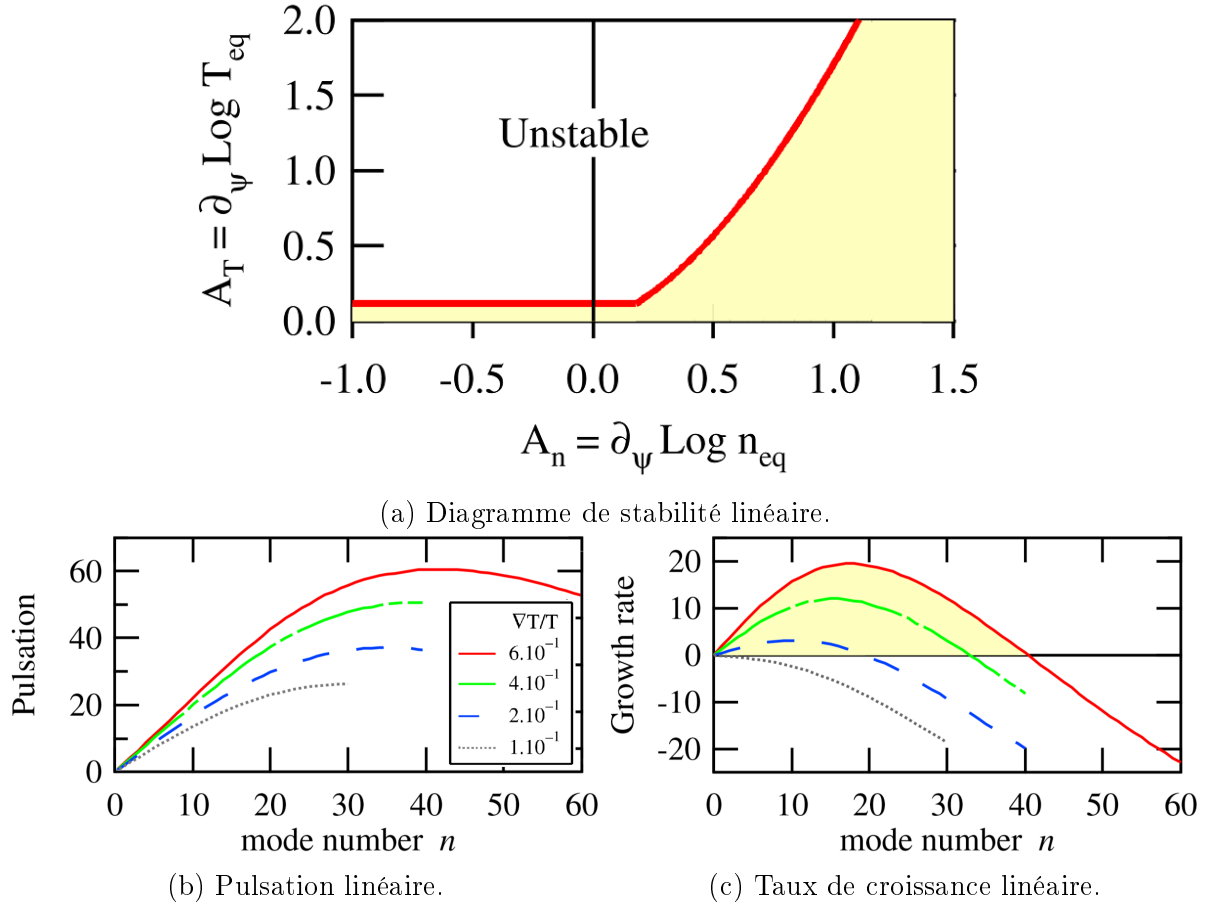


FIGURE 4.3 – Analyse linéaire du modèle d'ions piégés présenté dans [Sarazin 2005]. Valeurs des paramètres $C_e = C_i = 10^{-1}$, $\delta_b = 10^{-1}$, $\rho_c \simeq 0.06$ et $\omega_d = 1$.

La version à N espèces cinétiques (ioniques et électroniques) a un diagramme de stabilité plus riche grâce à une équation de Vlasov et une équation de quasi-neutralité basées sur plusieurs espèces aux propriétés différentes faisant apparaître d'autres pôles dans la relation de dispersion (voir [Drouot 2014b]). Dans les deux cas, un point important est le fait que le mode le plus instable qui respecte les conditions aux bords est le mode $\sin(\pi\psi/L_\psi)$, un mode global. Cette propriété se retrouve dans les simulations où les structures radiales ont une extension comparable à la taille L_ψ du domaine de simulation.

4.2 Code TERESA : Semi-Lagrangien & HPC

Le choix des méthodes numériques et informatiques adaptées aux architectures des calculateurs actuels a été calqué sur celles retenues pour le code GYSELA [Grandgirard 2007, Grandgirard 2008, Abiteboul 2013, Strugarek 2013]. Le code TERESA est donc un code Semi-Lagrangien écrit en FORTRAN et utilisant une parallélisation MPI/OpenMP.

4.2.1 Vlasov 2+2D Semi-Lagrangien : décomposition de domaine

En filtrant les angles variant à haute fréquence, on génère deux invariants adiabatiques. Ainsi l'espace 4D de l'équation de Vlasov n'est pas parcouru librement car aucune dérivée des deux invariants adiabatiques n'est permise. Il est alors naturel de décomposer le domaine 4D en tranches 2D ($\alpha \in [0, 2\pi], \psi[0, 1], \kappa, E$) indépendantes pour distribuer la résolution de Vlasov sur les unités de calculs. Un splitting de Strang à l'ordre 2 est utilisé pour l'intégration temporelle. Il est décomposé en 12 étapes pour, à partir de $\bar{f}(t)$ et $\Phi(t)$, construire une prédiction à l'ordre 1 du point moyen $\bar{f}(t + \Delta t/2)$ et $\Phi(t + \Delta t/2)$, puis une correction à l'ordre 2 du point moyen afin d'obtenir $\bar{f}(t + \Delta t)$ et $\Phi(t + \Delta t)$. Certaines étapes du calcul, comme l'inclusion de la diffusion, de pertes parallèles, voire de la source, dépendent des options de simulations qui ont été choisies.

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{f} &= [\bar{\Phi}, \bar{f}] - E\omega_d \partial_\alpha \bar{f} + D(\bar{f}) + S(\bar{f}, \Phi) + C(\bar{f}, \Phi) \\ \bar{f}^1 &= \bar{f}(t) + \Delta t/2 \quad D(\bar{f}(t)) \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\bar{f}^2 = \bar{f}^1 - \Delta t/2 \quad E\omega_d \partial_\alpha \bar{f}^1 \quad (4.23)$$

$$\bar{f}^3 = \bar{f}^2 + \Delta t/2 \quad S(\bar{f}^2, \Phi(t)) \quad (4.24)$$

$$\bar{f}^4 = \bar{f}^3 + \Delta t/2 \quad C(\bar{f}^3, \Phi(t)) \quad (4.25)$$

$$\bar{f}(t + \Delta t/2) = \bar{f}^4 + \Delta t/2 \quad [\bar{\Phi}(t), \bar{f}^4] \quad (4.26)$$

$$\bar{f}(t + \Delta t/2) \Rightarrow \Phi(t + \Delta t/2) \quad (4.27)$$

$$\bar{f}^5 = \bar{f}^2 + \Delta t/2 \quad S(\bar{f}^2, \Phi(t + \Delta t/2)) \quad (4.28)$$

$$\bar{f}^6 = \bar{f}^5 + \Delta t/2 \quad C(\bar{f}^5, \Phi(t + \Delta t/2)) \quad (4.29)$$

$$\bar{f}^7 = \bar{f}^6 + \Delta t \quad [\bar{\Phi}(t + \Delta/2), \bar{f}^6] \quad (4.30)$$

$$\bar{f}^8 = \bar{f}^7 + \Delta t/2 \quad C(\bar{f}^7, \Phi(t + \Delta t/2)) \quad (4.31)$$

$$\bar{f}^9 = \bar{f}^8 + \Delta t/2 \quad S(\bar{f}^8, \Phi(t + \Delta t/2)) \quad (4.32)$$

$$\bar{f}^{10} = \bar{f}^9 - \Delta t/2 \quad E\omega_d \partial_\alpha \bar{f}^9 \quad (4.33)$$

$$\bar{f}(t + \Delta t) = \bar{f}^{10} + \Delta t/2 \quad D(\bar{f}^{10}) \quad (4.34)$$

$$\bar{f}(t + \Delta t) \Rightarrow \Phi(t + \Delta t) \quad (4.35)$$

$\bar{f}(t)$ et $\Phi(t)$ sont supposés connus en début d'intégration temporelle, ainsi le calcul de $\Phi(t + \Delta t)$ en fin d'intégration est alors utilisé pour calculer le pas d'intégration suivant. Ceci synchronise le potentiel électrique et la fonction de distribution au même instant $t + \Delta t$ en fin d'intégration temporelle ce qui permet de calculer de façon précise les diagnostics au temps $t + \Delta t$. Il est à noter que la différence entre le potentiel au temps $t + \Delta t/2$ et $t + \Delta t$

est cruciale pour la vérification de code avec la méthode PoPe. L'ordre des opérateurs dans le splitting est organisé pour minimiser la répétition de calculs entre l'étape de prédiction et celle de correction : l'ensemble des calculs effectués pour la prédiction qui ne dépendent pas du potentiel électrique sont réutilisables pour la phase de correction.

4.2.1.1 Zone tampon : régularisation du bord

Les zones tampons sont des zones proches des bords en ψ où le transport turbulent est progressivement forcé à zéro en stabilisant la turbulence de sorte qu'aucune structure du potentiel électrique ou de la fonction de distribution ne traverse les bords de la boîte de simulation. Un tel événement est à éviter car il pose des problèmes de stabilité numérique (forts gradients) et physique (si une particule faisant le tour d'une structure de potentiel sort de la boîte, faut-il la faire rentrer ? avec quelles propriétés ?). Deux opérateurs sont implémentés pour satisfaire cette contrainte :

$$\text{Lapacien : } \partial_t \bar{f} = D_1(\bar{f}) = \mu_1(\psi) \partial_\psi^2 \bar{f} \quad (4.36)$$

$$\text{Krook : } \partial_t \bar{f} = D_2(\bar{f}) = -\mu_2(\psi)(\bar{f} - \bar{f}_{eq}) \quad (4.37)$$

avec $\mu_1, \mu_2 \geq 0$. Pour que les opérateurs ne soient actifs que dans une zone bien délimitée, un profil régulier déterminé par des fonctions tangentes hyperboliques $\mu(\psi)$ les pondère :

$$\mu(\psi) = \mu - \frac{\mu}{2} \tanh((\psi - \psi_0)/L_\mu) - \frac{\mu}{2} \tanh((L_\psi - \psi)/L_\mu) \quad (4.38)$$

Le premier opérateur (eq.(4.36)) est une diffusion dans la dimension ψ . Elle est calculée en utilisant le schéma de Crank-Nicolson [Crank 1996]. Cet opérateur possède un sens physique intéressant en terme de transport car il convertit le flux de transport turbulent en un flux de transport diffusif.

Le second opérateur (eq.(4.37)) est un "Krook", une force de rappel qui fait tendre le système vers la cible \bar{f}_{eq} avec une fréquence caractéristique déterminée. Ce dernier opérateur est la forme la plus simple d'un opérateur de pertes parallèles.

4.2.1.2 Pertes parallèles : saturation des grandes structures

Bien que le code soit essentiellement utilisé sans collision, des opérateurs de pertes parallèles ont été implémentés dans le but d'accéder à des phénoménologies inaccessibles autrement, ainsi que pour faciliter la vérification du code.

Le premier opérateur de pertes parallèles est un opérateur similaire au puits de l'équation sur la densité de TOKAM2D (eq.(3.1)). Il a été introduit pour changer le spectre dans l'espace réel de la fonction de distribution. Un tel terme empêche les modes $\sin(\pi\psi/L_\psi)$ d'être les plus instables. Le système n'est plus dominé par des modes globaux quasi-stationnaires. L'auto-organisation du transport turbulent sous forme d'avalanches devient alors possible. Soit $P(E)$ un polynôme en énergie choisi parmi les polynômes de Laguerre pour ne pas impacter certain moment de la fonction de distribution, les pertes sont :

$$\partial_t \bar{f} = C_1(\Phi) = -\sigma \Phi P(E/T_0) e^{-E/T_0} \quad (4.39)$$

$P(E) = 1 - \frac{2}{5}E/T_0$ permet de ne pas impacter le moment correspondant à la pression. Cet opérateur dépend explicitement du potentiel électrique mais pas de la fonction de distribution. Il doit être répété trois fois dans le splitting temporel pour être calculé en utilisant $\Phi(t + \Delta t/2)$ et respecter l'alternance de la méthode de Strang.

Le second opérateur de pertes parallèles est un opérateur d'hyperviscosité dans la direction ψ qui est utilisé pour modifier l'amplitude des modes aux grands nombres d'onde. Le modèle de TERESA utilisé sans perte parallèle donne des solutions avec de très larges spectres sensibles au problème d'aliasing. Filtrer dans une direction non-périodique étant plus coûteux que dans une direction périodique, cet opérateur est à considérer comme une astuce numérique similaire à l'utilisation d'une viscosité dans TOKAM2D.

$$\partial_t \bar{f} = C_2(\bar{f}) = -\nu \partial_\psi^4 \bar{f} \quad (4.40)$$

L'estimation de ∂_ψ^4 est effectuée sur 5 points en différences finies pour atteindre l'ordre 2 en espace. L'intégration temporelle suit le schéma semi-implicite à l'ordre 2 de Crank-Nicolson, elle utilise une inversion de matrice pentadiagonale. Les conditions aux bords sont des conditions de Dirichlet pour le bord externe et Dirichlet ou Neumann pour le bord interne. Les deux premiers points à l'intérieur du domaine en partant des deux bords ne sont pas soumis à l'hyperviscosité pour ne pas déformer la matrice bande. Comme ce second opérateur ne dépend pas du potentiel électrique, il ne doit être répété que deux fois dans le splitting temporel.

4.2.1.3 Advection linéaire et non-linéaire

L'hamiltonien au cœur de l'équation de Vlasov peut se décomposer en deux opérateurs, le premier non-linéaire et le second linéaire : $[\bar{H}, \bar{f}] = [\bar{\Phi}, \bar{f}] + E\omega_d \partial_\alpha \bar{f}$. Cette décomposition analytique peut être utilisée pour faire un splitting numérique car la divergence du champ d'advection $(E\omega_d, 0)$ est nulle. L'intérêt d'une telle distinction est de pouvoir utiliser une méthode avec une faible erreur pour le terme linéaire, dont les déplacements peuvent être grands aux énergies élevées, par rapport aux petits déplacements dus à la perturbation électrostatique non linéaire. Le terme linéaire $\partial_t \bar{f} = -E\omega_d \partial_\alpha \bar{f}$ est traité avec l'algorithme suivant :

$$\frac{\hat{f}_{k_\alpha}(\Delta t + t) - \hat{f}_{k_\alpha}(t)}{\Delta t} \simeq -E\omega_d \frac{1}{2} (\partial_\alpha \hat{f}_{k_\alpha}(t + \Delta t) + \partial_\alpha \hat{f}_{k_\alpha}(t)) \quad (4.41)$$

$$\hat{f}_{k_\alpha}(t + \Delta t) \simeq \hat{f}_{k_\alpha}(t) \frac{2 - iE\omega_d \Delta t k_\alpha}{2 + iE\omega_d \Delta t k_\alpha} \quad (4.42)$$

La partie linéaire peut aussi être traitée comme une translation solide en utilisant une interpolation via des splines ce qui est équivalent à un changement de phase dans l'espace de Fourier. Dans le second cas, l'algorithme devient :

$$-i\omega \hat{f}_{\omega, k_\alpha} = -iE\omega_d k_\alpha \hat{f}_{\omega, k_\alpha} \quad (4.43)$$

$$\hat{f}_{k_\alpha}(t + \Delta t) = \hat{f}(t)_{k_\alpha} e^{i\Delta t E\omega_d k_\alpha} \quad (4.44)$$

Cette approche est la plus précise en termes de dispersion de phase et de dissipation. En pratique, cette décomposition n'est pas utilisée car elle engendre un surcoût de calcul alors qu'elle ne diminue pas la principale source d'erreur qu'est l'advection non-linéaire.

La partie non-linéaire, incluant ou non l'advection linéaire, est traitée avec une méthode Semi-Lagrangienne. Cette méthode repose sur la méthode des caractéristiques qui s'applique à l'équation de Vlasov sans second membre. La forme conservative de l'équation de Vlasov $df/dt = \partial_t f - [H, f] = 0$ garantit l'invariance de f le long des trajectoires définies par $[H, \cdot]$. Soit $X(t)$ la courbe définissant la trajectoire d'une particule soumise à l'hamiltonien H , alors $f(X(t), t) = f(X(t + \tau), t + \tau)$ pour toute valeur de τ . Cette propriété permet de déterminer la valeur de $f(X(t + \tau), t + \tau)$ en connaissant $f(X(t), t)$ ainsi que la trajectoire $X(t)$ entre les deux instants t et $t + \tau$. La discrétisation de ce principe fait appel à 2 définitions :

- 1 soit $f(t)$ connue sur une grille G de N points.
- 2 à chacun des N points de la grille G décrivant $f(t + \Delta t)$ est associée une trajectoire caractéristique $X_i(t + \Delta t)$.

A partir de ces deux définitions, 2 étapes de calcul sont nécessaires :

- 1 le pied $X_i(t)$ de chaque trajectoire est déterminé par une méthode de Newton-Raphson ou de Taylor [Grandgirard 2006].
- 2 connaissant la position des pieds des trajectoires à l'instant t , une interpolation basée sur des splines est utilisée pour déterminer la valeur $f(X(t)) = f(X(t + \Delta t))$ à partir de la connaissance de $f(t)$ sur la grille G .

Une méthode de Newton et une méthode de Taylor sont implémentées pour déterminer le pied des caractéristiques. La méthode de Newton résout un problème de point fixe en cherchant un déplacement \vec{d} qui soit compatible avec un champ d'advection V et une position finale $X_i(t + \delta t)$. Dans la phase de prédiction, le champ d'advection est connu en t , les positions initiale et finale sont $X_i(t)$ et $X_i(t + \Delta t/2)$. Dans la phase de correction, le champ d'advection est connu en $t + \Delta t/2$, les positions initiales et finales sont $X_i(t)$ et $X_i(t + \Delta t)$. Le formalisme suivant permet d'utiliser la même méthode pour les deux problèmes en définissant $\vec{d} = X_i(t + \Delta t/2) - X_i(t)$ ou $2\vec{d} = X_i(t + \Delta t) - X_i(t)$:

$$\vec{d} = (\Delta t/2) V(X(t + \Delta t/2) - \vec{d}, t) \quad (4.45)$$

$$2\vec{d} = \Delta t V(X(t + \Delta t) - \vec{d}, t + \Delta t/2) \quad (4.46)$$

4.2.1.4 Utilisation d'une source en forçage par le flux

Le terme source $S(\bar{f}, \Phi)$ regroupe un ensemble de plusieurs termes agissant dans l'espace des vitesses de façon à ne pas modifier le premier moment de la fonction de distribution (densité supposée constante) mais en influant sur les autres moments. L'approche la plus utilisée est une simple décomposition de l'espace des vitesses sur la base de polynômes de Laguerre L_i orthogonaux par rapport à la densité $2\sqrt{E}e^{-E}/\pi$, tels que

$\langle L_i | L_j \rangle = \int_0^\infty L_i L_j \sqrt{E} e^{-E} dE = \delta_{i,j}$. L'expression analytique de cette source est :

$$S_1(\alpha, \psi, E) = S_0 S_\alpha(\alpha) S_\psi(\psi) L_1(E) e^{-E} \quad (4.47)$$

$$L_1(E) \propto \sqrt{3/2}(E - 3/2) \quad (4.48)$$

Les profils S_α et S_ψ sont des fonctions portes régularisées basées sur des tangentes hyperboliques permettant de localiser la source dans l'espace réel. L'intégration temporelle est effectuée en tenant compte de la trajectoire de la particule entre les instants t et $t + \Delta t$. Pour cela, le potentiel électrique est utilisé, donc cette correction nécessite de déterminer le terme source à trois reprises dans le splitting temporel. Soit $X(t)$ la trajectoire d'une particule au cours du temps, soit $\vec{V}(X, t)$ le champ d'advection au cours du temps, la solution analytique de l'impact de la source est discrétisée ainsi :

$$\frac{d\bar{f}}{dt} = \partial_t \bar{f}(X(t), t) = S(X, t) \quad (4.49)$$

$$\bar{f}(X(t + \Delta t), t + \Delta t) = \bar{f}(X(t), t) + \int_t^{t+\Delta t} S(X(\tau), \tau) d\tau \quad (4.50)$$

$$S(X(t + \Delta t - \delta t), t + \Delta t - \delta t) \simeq S(X(t + \Delta t), t + \Delta t) \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} & -\delta t V_\alpha(X(t + \Delta t), t + \Delta t - \delta t/2) \partial_\alpha S|_{X(t+\Delta t)} \\ & -\delta t V_\psi(X(t + \Delta t), t + \Delta t - \delta t/2) \partial_\psi S|_{X(t+\Delta t)} + \mathcal{O}(\delta t) \end{aligned}$$

$$\int_t^{t+\Delta t} S(X(\tau), \tau) d\tau \simeq \Delta t (S(X(t + \Delta t), t + \Delta t) \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} & -\Delta t/2 V_\alpha(X(t + \Delta t), t + \Delta t/2) \partial_\alpha S|_{X(t+\Delta t)} \\ & -\Delta t/2 V_\psi(X(t + \Delta t), t + \Delta t/2) \partial_\psi S|_{X(t+\Delta t)} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

Cette description basée sur un champ d'advection V fut initialement implémentée en utilisant $V(\alpha, \psi, \kappa, E) = \nabla \bar{\Phi}(\alpha, \psi, E)$, la définition théorique du champ d'advection. Cependant l'utilisation de l'opérateur \mathcal{J} introduit une dépendance en énergie du champ d'advection. Cette dépendance est assez forte pour perturber la décomposition sur les polynômes de Laguerre : $\langle V(E) L_i | L_j \rangle = \int_0^\infty V(E) L_i L_j \sqrt{E} e^{-E} dE \neq \delta_{i,j}$, ce qui occasionne la modification du premier moment de la fonction de distribution : la densité est modifiée donc le plasma se polarise localement. Pour contourner ce problème tout en utilisant une intégration de la source précise, toute dépendance en énergie du champ V a été supprimée : une approximation du champ moyen d'advection est utilisée. Le principal défaut de cette source est que pour chauffer la fonction de distribution, la source déplace des particules à basse énergie ($E < 3/2$) vers les hautes énergies ($E > 3/2$) sans prendre en compte la forme de la fonction de distribution : si le réservoir de particules à basse énergie est vide, la source forcera alors la fonction de distribution à prendre des valeurs négatives. Pour éviter cela, un mécanisme de variation de l'amplitude de la source au cours du temps a été mis en place : lorsque il n'y a plus de particules à basse énergie, la source s'arrête, si un phénomène de transport repeuple la fonction de distribution, la source se rallume en modulant son amplitude pour ne pas déplacer plus de particules qu'il n'en existe.

4.2.1.5 Mise en place d'une procédure de filtrage : vérification de code

Le chapitre sur PoPe a mis l'accent sur l'utilisation d'un filtre P_v pour garantir que les méthodes numériques utilisées ne sont pas prises en défaut en séparant la dynamique en une composante valide et une composante non valide. Cet aspect est particulièrement bien illustré par le modèle de Rayleigh-Bénard cinétique sans collision. En effet, il apparaît dans ces simulations de forts gradients, la fonction de distribution possède en conséquence un spectre avec une faible décroissance. Le traitement de ces fronts entre zone «chaude» et zone «froide» ne peut être absolument correct ; le filtre ne doit retenir que les composantes de ces fronts qui sont correctement capturées par le schéma numérique, tout en supprimant les composantes qui seront trop fortement approximées.

Dans le code TOKAM2D bi-périodique il est facile d'utiliser un filtre d'anti-aliasing supprimant 1/3 du spectre. Un tel filtre n'est applicable qu'à la dimension périodique α pour le code TERESA. Périodiser la dimension ψ pour ensuite effectuer un filtrage dans l'espace de Fourier est cher en temps de calcul et ce filtre ne peut assurer le respect des conditions aux bords. Effectuer le filtrage d'une perturbation définie par rapport à un équilibre dans le but de périodiser la fonction $\delta\bar{f} = \bar{f} - \langle \bar{f} \rangle_\alpha$ permet de conserver les conditions aux bords. Cependant, cette séparation d'échelle n'a permis ni d'améliorer le comportement du code, ni de faciliter la vérification. Le filtre le plus prometteur fait appel aux ondelettes car elles ne sont pas coûteuses (juste des manipulations de case mémoire, très peu de calcul) et peuvent être utilisées dans des directions périodiques comme non périodiques. Leur utilisation améliore le comportement du code et facilite la vérification. Cependant, l'utilisation de cette méthode n'a pas permis de retrouver une erreur relative aussi faible que pour le code TOKAM2D. Le filtrage de de-aliasing présenté [Lapillonne 2008], basé sur une méthode d'interpolation, n'a pas été utilisé car ce dernier apparaît trop perturbatif : l'ensemble du spectre est touché alors qu'un filtre de Fourier ou les ondelettes sont plus sélectives. La recherche d'un filtre par ondelettes mieux adapté au problème est donc nécessaire si l'on veut améliorer le code et sa vérification.

Une alternative au filtre purement numérique est un filtre de nature "physique", comme l'ajout de viscosité dans TOKAM2D pour modifier la forme de la solution (amortissement des modes élevés). En effet, l'apparition de discontinuités, comme les fronts dans TERESA, est en contradiction avec les résultats attendus pour ce modèle qui doit alors être corrigé, en général par des effets collisionnels. Pour une turbulence basse fréquence, la dynamique attendue était un comportement d'avalanche qui n'aurait pas permis la mise en place de forts gradients. La dernière approche consiste alors à ajouter une hyperviscosité $\partial_t f = -\nu \partial_\psi^4 f$. Cette approche reste la plus facile à mettre en œuvre et la plus universelle en terme de discrétisation : utiliser un filtre dans l'espace de Fourier ou des ondelettes sur un maillage non cartésien (hexagonal, non uniforme...) demande un effort supplémentaire par rapport au simple ajout d'une hyperviscosité. L'ajout d'un opérateur de perte parallèle réaliste (respectant symétries / conservations) est d'une complexité supérieure à l'ajout d'un hyperviscosité, ainsi cette possibilité est essentiellement motivée par des raisons physiques et non simplement de vérification de code.

4.2.2 Champ d'advection issu de la quasi-neutralité 2D

La détermination du champ d'advection $\nabla\bar{\Phi}$ utilisé dans l'équation de Vlasov nécessite l'utilisation de l'opérateur de moyenne à deux reprises pour passer de la représentation 4D de la fonction de distribution des centres-bananes (dans l'équation de Vlasov) à l'espace 2D de la densité de particules (utilisée par l'équation de quasi-neutralité). Une procédure similaire est suivie pour déterminer le champ d'advection $\nabla\bar{\Phi}$ à partir du potentiel électrique Φ .

4.2.2.1 Membre de droite : moyenne \mathcal{J}_0 et intégration de l'espace des vitesses

La résolution de l'équation de quasi-neutralité commence par le calcul du membre de droite de l'équation eq.(4.13) :

$$RHS = \frac{2}{\sqrt{\pi}n_{eq}(\psi)} \int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \bar{f} - 1 \quad (4.53)$$

La première étape de calcul est la détermination de $\bar{f} = \mathcal{J}_{0,\rho_c,s\delta_{b,s}} \bar{f}$. L'opérateur de moyenne peut être discrétisé et approximé en utilisant plusieurs méthodes laissées au choix dans le code. La première et la plus conventionnelle des méthodes est l'approche de Padé [Crouseilles 2010] où les fonctions de Bessel utilisées dans la solution analytique sont approximées par un développement basé sur des laplaciens, ici un seul laplacien :

$$\bar{f} = \mathcal{J}_{0,\rho_c,s\delta_{b,s}} \bar{f} \quad (4.54)$$

$$\simeq \sum_{k_\alpha, k_\psi} \frac{1}{2\pi} \int \hat{f}_{k_\alpha, k_\psi}(\kappa, E) \mathcal{J}_0(\rho_c k_\alpha) \mathcal{J}_0(\delta_b k_\psi) \quad (4.55)$$

$$\simeq \left(1 - \frac{E\delta_b^2}{4}\partial_\psi^2\right)^{-1} \left(1 - \frac{E\rho_c^2}{4}\partial_\alpha^2\right)^{-1} \bar{f} \quad (4.56)$$

La résolution de cette approximation est effectuée en deux étapes $\tilde{f} = \left(1 - \frac{E\delta_b^2}{4}\partial_\psi^2\right)^{-1} \bar{f}$ puis $\bar{f} = \left(1 - \frac{E\rho_c^2}{4}\partial_\alpha^2\right)^{-1} \tilde{f}$. Ce splitting introduit une erreur en $\mathcal{O}(\Delta\alpha^2\Delta\psi^2)$ jugée suffisamment faible par rapport au gain de temps apporté. La résolution 2D directe demande l'inversion d'un système matriciel de taille $N_\alpha N_\psi \times N_\alpha N_\psi$ avec un coût $\propto N_\alpha N_\psi^2$. La résolution de N_α systèmes de taille $N_\psi \times N_\psi$ et N_ψ systèmes de taille $N_\alpha \times N_\alpha$ a un coût $\propto N_\alpha N_\psi$ (matrice tridiagonale). Ce splitting permet la parallélisation du calcul des $N_\psi + N_\alpha$ systèmes à résoudre. Il permet aussi de diminuer la taille du problème et de bénéficier d'effets de cache, c'est-à-dire la diminution du temps de calcul due à une meilleure utilisation du système de mémoire des cœurs de calcul. Une méthode alternative utilisant une transformée de Fourier pour effectuer les calculs dans la direction périodique n'a pas apporté une amélioration de la précision suffisante pour être retenue. L'utilisation de la projection dans l'espace de Fourier est plus intéressante en considérant les fonctions de Bessel. Soit une fonction affine $a\psi + b = f(\psi)$, l'opérateur moyennant la fonction $f(\psi)$

sur les deux points distants de δ par rapport à ψ_0 en dimension 1 est :

$$\mathcal{J}_0(f)(\psi_0) = \frac{1}{2}(f(\psi_0 + \delta)) + \frac{1}{2}f(\psi_0 - \delta) \quad (4.57)$$

$$\mathcal{J}_0(a\psi + b)(\psi_0) = \frac{1}{2}(a(\psi_0 + \delta) + b) + \frac{1}{2}(a(\psi_0 - \delta) + b) \quad (4.58)$$

$$\mathcal{J}_0(a\psi + b)(\psi_0) = \mathbb{I}(a\psi + b)(\psi_0) = a\psi_0 + b \quad (4.59)$$

En ajoutant l'hypothèse de linéarité, eq.(4.59) à l'invariance d'une fonction affine par l'opérateur de moyenne, la seconde méthode de résolution fait appel à la décomposition suivante :

$$\bar{f} = a\psi + b + \delta\bar{f} \quad (4.60)$$

$$\bar{\bar{f}} = \mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}(a\psi + b + \delta\bar{f}) \quad (4.61)$$

$$= \mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}(a\psi + b) + \mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}(\delta\bar{f}) \quad (4.62)$$

$$\simeq a\psi + b + \mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}(\delta\bar{f}) \quad (4.63)$$

A partir de ce résultat et en considérant que les zones tampons aplatissent la fonction de distribution de la même façon sur les deux bords, le terme $\delta\bar{f}$ se trouve naturellement périodique en ψ , ce qui permet de passer dans l'espace de Fourier pour résoudre $\mathcal{J}_{0,\rho_{c,s}\delta_{b,s}}(\delta\bar{f}) = \delta\bar{f}$ sans augmenter la taille du maillage. A priori, cette décomposition n'est pas valable sur les bords car la fonction de distribution est supposée constante à l'extérieur du domaine de simulation, donc en contradiction avec le prolongement de l'équilibre linéaire. L'erreur étant restreinte à la région des zones tampons, où par construction la fonction de distribution est proche d'une solution d'équilibre, donc sans dynamique, on peut considérer qu'elle est de la sorte minimisée. Aucun impact significatif sur la physique n'a été observé entre les deux discrétisations de l'opérateur de moyenne.

La seconde étape de la détermination du membre de droite est le calcul de l'intégrale de $\bar{\bar{f}}$ dans l'espace des vitesses. Étant donné que $\bar{\bar{f}}(E) \propto e^{-E}$, l'intégration est décomposée en deux intégrales pour préserver les détails de la fonction de distribution aux hautes énergies.

$$\int \bar{\bar{f}} dE = \int \langle \bar{\bar{f}} \rangle_\alpha dE + \int \bar{\bar{f}} - \langle \bar{\bar{f}} \rangle_\alpha dE \quad (4.64)$$

$$= n_{eq}(\psi) + \delta n(\alpha, \psi) \quad (4.65)$$

Cette décomposition est particulièrement intéressante dans l'approche à N espèces où $\sum_s n_{eq,s}(\psi) \simeq 0$. La mesure des taux de croissance linéaire est aussi facilitée car la mesure du terme résultant de la quasi-compensation des densités de charge est beaucoup plus précise lorsque l'on réduit de plusieurs ordres de grandeurs les termes entrant effectivement dans la compensation.

4.2.2.2 Décomposition spectrale de la quasi-neutralité linéarisée

La formulation de l'équation de quasi-neutralité change légèrement selon le nombre d'espèces simulées, la réponse adiabatique des électrons ainsi que la prise en compte des particules passantes. Néanmoins, le problème prend toujours la forme :

$$c_1\Phi + c_2 < \Phi >_\alpha + c_3\partial_\alpha^2\Phi + c_4\partial_\psi^2\Phi = \beta \quad (4.66)$$

Des expressions analytiques, qui dépendent du modèle choisi, définissent chaque constante c_i et le membre de droite β . La nécessité de connaître la moyenne de l'inconnue selon la direction périodique α pour déterminer l'inconnue dans sa totalité (partie adiabatique) suggère une décomposition de ce problème linéaire dans l'espace de Fourier. Soit $\Phi(\alpha, \psi) = \sum_m \hat{\Phi}_m(\psi)e^{im\alpha}$ et $\bar{n}(\alpha, \psi) = \sum_m \hat{\bar{n}}_m(\psi)e^{im\alpha}$ la décomposition en Fourier de l'inconnue et de la densité, soit $\delta_{0,m}$ le symbole de Kronecker nul pour $m \neq 0$. Alors l'équation de quasi-neutralité devient pour tout m :

$$\{C_e(1 - \delta_{0,m}\lambda) - C_i(-\rho_c^2 m^2 + \delta_b^2 \partial_\psi^2)\} \hat{\Phi}_m(\psi) = \frac{\hat{\bar{n}}_m(\psi)}{n_{eq}(\psi)} - \delta_{0,m} \quad (4.67)$$

Cette décomposition transforme la résolution d'un problème 2D de taille $N_\alpha N_\psi \times N_\alpha N_\psi$ en N_α problèmes de taille $N_\psi \times N_\psi$. Comme pour la résolution de l'opérateur de moyenne, cette décomposition réduit la quantité totale de calculs et permet d'optimiser l'utilisation des ressources en parallélisant le calcul et en tirant profit de la réduction de l'empreinte mémoire. L'opérateur de dérivée seconde en ψ est discrétisé sur 5 points ce qui conduit à l'assemblage d'une matrice pentadiagonale. Les conditions aux bords sont de type Dirichlet pour l'ensemble des modes m , sauf pour le bord interne du mode $m = 0$ qui peut être au choix : Dirichlet ou Neumann. L'utilisation de Dirichlet des deux côtés facilite l'estimation de l'énergie dans le système ; l'utilisation de Neumann enlève une contrainte forte sur le potentiel par rapport à Dirichlet où le champ électrique radial ne peut se développer sur l'ensemble du domaine car les deux côtés de la boîte de simulation sont au même potentiel. Si un filtre basé sur la mise à zéro de 1/3 du spectre dans la dimension α est utilisé, alors une réduction de 1/3 des calculs est obtenue en forçant directement les coefficients de Fourier à zéro. Enfin, un mécanisme de renormalisation de la densité d'équilibre est utilisé pour garantir que les erreurs identifiées ne conduisent pas à une polarisation artificielle du plasma. En effet, l'équation de Vlasov permet aux particules de quitter la boîte de simulation mais sans réintroduire des particules pour compenser les pertes car il n'existe pas de modèle pour fixer les propriétés d'une telle source. Pour être sûr de vérifier $\sum_s \rho_s = 0$ à chaque instant, la densité d'équilibre est mise à jour pour tenir compte de la perte de particules. Cette approche n'est pas satisfaisante car elle répartit instantanément la charge perdue localement, mais elle présente l'avantage de limiter la propagation d'erreur.

4.2.2.3 Détermination du champ d'advection 4D à partir du potentiel 2D

A partir du potentiel électrique, une étape de moyenne est effectuée pour transformer le potentiel électrique 2D $\Phi(\alpha, \psi)$ en un potentiel électrique 3D $\bar{\Phi}(\alpha, \psi, E)$. En effet, le modèle gyro-cinétique utilise directement le champ d'advection $\nabla \bar{\Phi}$. Trois méthodes différentes ont été utilisées pour cela : une approche par différences finies soit à l'ordre 2, soit à l'ordre 4, l'utilisation d'une dérivée dans l'espace de Fourier pour la dimension périodique et l'utilisation des splines comme pour l'interpolation des pieds des caractéristiques. Les différences finies sont la méthode retenue pour son coût inférieur et son erreur comparable aux autres approches dans les simulations de production.

4.2.3 Environnement HPC du code TERESA

Le code TERESA utilise les outils classiques du monde HPC et du développement informatique : le code est écrit en fortran et utilise MPI / OpenMP, les sorties sont sauvegardées en HDF5, les post-traitements sont réalisés par un ensemble de scripts Python, toutes les sources sont sur un gestionnaire de version (SVN). L'allocation annuelle en temps de calcul pour TERESA est de $\simeq 200 \times 10^3 h.core$ sur Rheticus¹ depuis trois ans. Les indices de performance du code et en particulier l'étude précise du solveur de quasi-neutralité sont détaillés dans [Cartier-Michaud 2013].

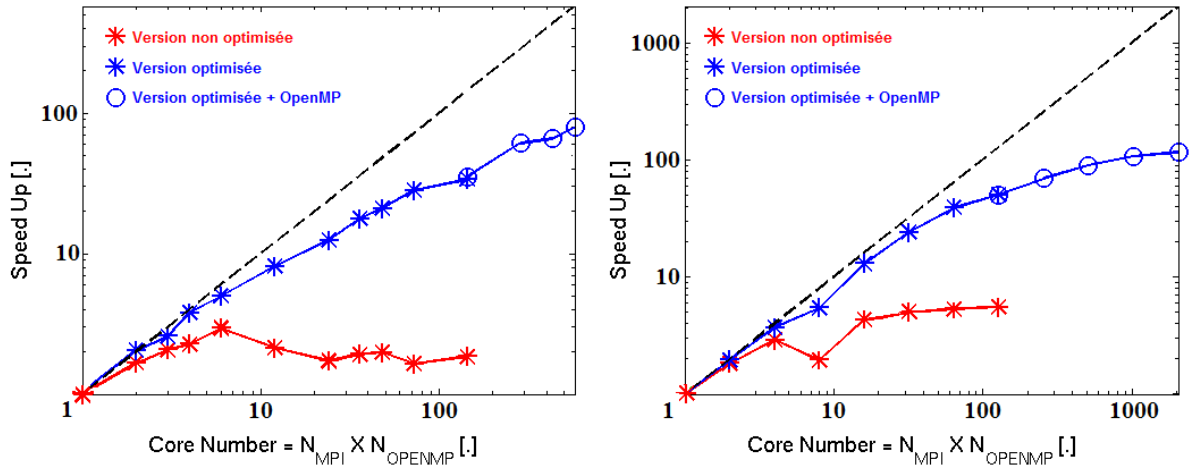
4.2.3.1 Communications MPI minimales, utilisation d'OpenMP secondaire

L'étude de la structure de Vlasov a montré la possibilité d'une décomposition sous forme de plans 2D (α, ψ) paramétrés par l'espace des vitesses 2D (κ, E) . Seule l'intégration dans l'espace des vitesses nécessite la connaissance globale de la fonction de distribution, que ce soit pour le calcul de diagnostics ou le calcul du membre de droite de la quasi-neutralité. Ainsi, chaque processus MPI possède un ensemble de coupes (α, ψ) sur lesquelles il gère les calculs des différents opérateurs liés à l'équation de Vlasov. Une seconde organisation MPI est utilisée pour résoudre l'équation de quasi-neutralité : soit un seul processus MPI regroupe le membre de droite et détermine le potentiel avant de le distribuer à l'ensemble des processus, soit le membre de droite est décomposé en modes de Fourier qui sont résolus par différents processus MPI avant d'être recombinaés par un unique processus qui communiquera ensuite la solution à l'ensemble des processus. La décomposition MPI impose une contrainte sur le nombre maximum de cœurs utilisables : il faut au minimum un plan (α, ψ) par processus soit un maximum de $N_E \times N_\kappa$ processus MPI utilisant un cœur chacun (avec N_E et N_κ le nombre de points dans les dimensions E et κ). Pour augmenter le nombre maximum de cœurs utilisables, une parallélisation OpenMP est utilisée dans chaque plan (α, ψ) . Ce second niveau de parallélisation permet à chaque processus MPI d'utiliser jusqu'à 12 cœurs sur la machine Rheticus. Dans les faits, cette possibilité n'est pas utilisée car elle n'est pas adaptée à la taille de ce calculateur ("seulement" 12×96 cœurs) et aux règles de priorités de lancement des calculs.

1. Ce travail a reçu une allocation sur le cluster de l'université d'Aix-Marseille, financé par le projet Equip@Meso (ANR-10-EQPX-29-01) du programme d' « Investissements d'Avenir » supervisé par l'Agence Nationale pour la Recherche.

4.2.3.2 Accélération et scalabilité apportées par la parallélisation

Un aperçu des performances de la parallélisation est présenté pour la version initiale du code, résolvant la totalité de la quasi-neutralité dans chacun des processus MPI (donc possédant une part importante de redondance) et la version la plus récente avec une distribution de la résolution de la quasi-neutralité sur un groupe de processus MPI. Le choix d'un maillage très fin dans l'espace réel met en évidence une limite de la première version du code : le temps de calcul ne diminue pas (voire augmente) avec l'utilisation d'un grand nombre de cœurs (voir Fig. 4.4).



(a) Speed-up réalisé sur Rheticus. Maillage : $N_\alpha \times N_\psi \times N_\kappa \times N_E = 1025 \times 1025 \times 1 \times 144$. (b) Speed-up réalisé sur Helios. Maillage : $N_\alpha \times N_\psi \times N_\kappa \times N_E = 2049 \times 2049 \times 1 \times 128$.

FIGURE 4.4 – Speed-ups (temps d'exécution sur N_{core} cœurs divisé par le temps d'exécution sur 1 cœur) de la résolution de l'équation de Vlasov et de la Quasi-Neutralité du code TERESA (sans diagnostics) réalisés sur la machine Rheticus et la machine Helios. Courbes rouges : première version de TERESA avec solveur de quasi-neutralité non optimisé, courbes bleues : version améliorée du solveur de quasi-neutralité. Cercles bleus : utilisation d'OpenMP en plus de MPI.

L'utilisation d'une discrétisation plus standard (256×256) fait apparaître une chute de performance identique mais pour un nombre de cœurs plus élevé, ce qui permettait d'éviter le problème de la perte de performance en augmentant le nombre de cœurs. Alors que la version initiale de TERESA était limitée par l'équation de quasi-neutralité sur les gros maillages, et en particulier par la bande passante mémoire disponible, la version parallélisée permet un speed-up d'un facteur 10 par rapport à l'ancienne version, ce qui permet de faire 10 fois plus de simulations pour un budget de calcul fixé. L'efficacité est proche de 50% sur 100 cœurs, c'est-à-dire avec un speed-up d'un facteur 50 par rapport à l'utilisation d'un unique cœur dans un test de strong-scaling (taille constante de maillage et nombre de cœurs qui augmente), l'efficacité pour du weak-scaling (taille du maillage par nombre de cœurs constante) se rapprochant de 90%. Avoir significativement accéléré le code permet de l'utiliser pour étudier la physique sur des temps longs et/ou de multiplier les simulations pour sonder l'espace des paramètres.

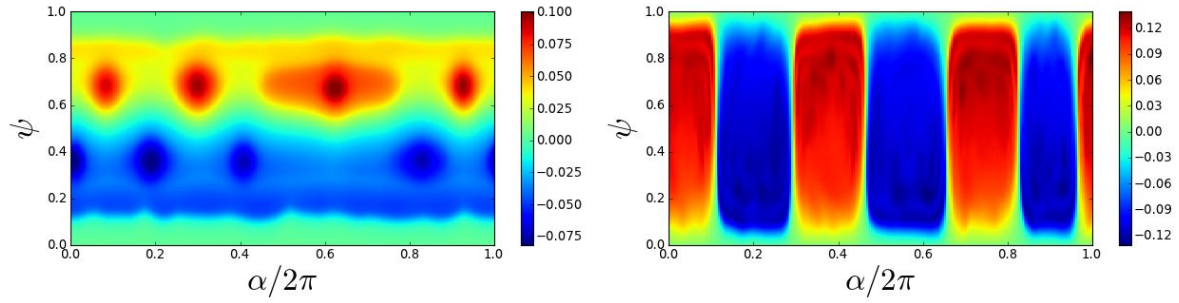
4.3 Vérification du code TERESA par la méthode PoPe

Le code TERESA a été vérifié par différentes méthodes : mesure du taux de croissance linéaire [Drouot 2014a] avec erreur relative inférieure au pour-cent, mesure de la conservation des moments et de l'énergie, Manufactured Method Solutions pour la quasi-neutralité et utilisation de PoPe pour la quasi-neutralité et Vlasov. Je me concentre ici sur les résultats apportés par la méthode PoPe sur des simulations standards.

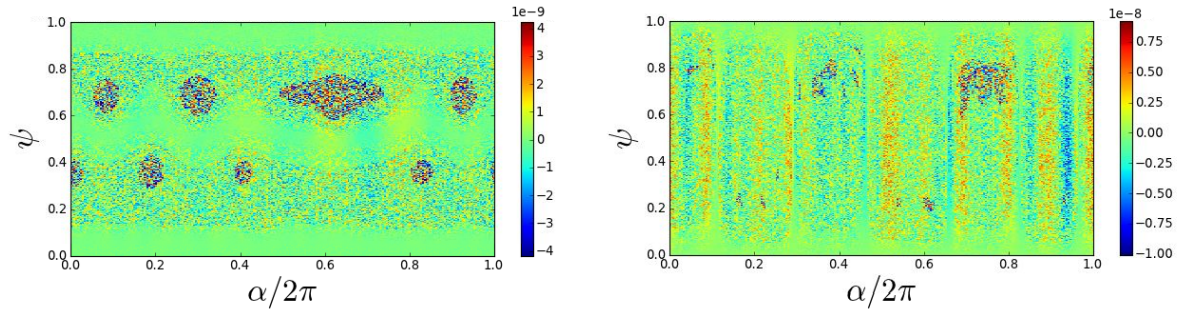
4.3.1 Vérification de la quasi-neutralité en régimes réalistes

L'introduction du paramètre λ pour la description des particules répondant de façon adiabatique au potentiel électrique a un impact direct sur le comportement physique du système. Pour $\lambda = 0$, l'apparition de structures de potentiel allongées dans la direction ψ génère un régime nommé «streamers». Pour $\lambda = 1$, l'apparition de structures de potentiel allongées dans la direction α correspond à des «flux zonaux». La topologie du potentiel est totalement différente dans ces deux solutions car la nature de l'équation change. La vérification du code est effectuée dans ces deux régimes caractéristiques. Dans le cas d'une équation d'équilibre comme la quasi-neutralité, le membre de droite du système linéaire résolu dans PoPe est le membre de droite de la quasi-neutralité, ce n'est plus une dérivée temporelle. La vérification se fait donc en estimant la valeur des quatre paramètres c_i de l'équation eq.(4.66) ainsi qu'en mesurant le résidu $\tilde{\varepsilon} = \beta - (\tilde{c}_1\Phi + \tilde{c}_2 < \Phi >_\alpha + \tilde{c}_3\partial_\alpha^2\Phi + \tilde{c}_4\partial_\psi^2\Phi)$ (l'écart entre l'équation retrouvée et la mesure effectuée sur le membre de droite, voir chapitre 2).

La figure 4.5 illustre l'erreur commise dans les deux régimes. Plus de 6 ordres de grandeur séparent le résidu $\tilde{\varepsilon}$ du membre de droite β . L'erreur relative des poids c_i , lorsque $c_i \neq 0$ est au minimum de 4 ordres de grandeur. L'équation de quasi-neutralité retrouvée avec la méthode PoPe dans les sorties de TERESA correspond à l'équation théoriquement implémentée. L'erreur résiduelle est suffisamment faible pour ne pas remettre en question l'approche utilisée pour résoudre l'équation dans TERESA.

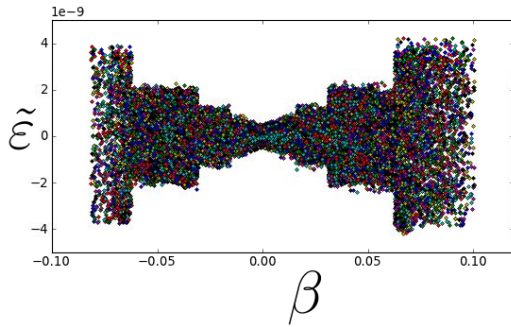


(a) membre de droite β en régime flux zonaux. (b) membre de droite β en régime streamers.

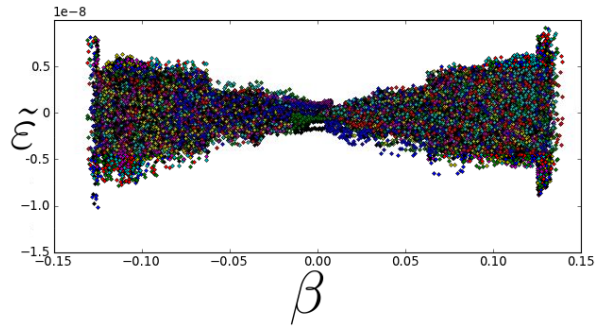


(c) erreur $\tilde{\varepsilon}$ en régime flux zonaux.

(d) erreur $\tilde{\varepsilon}$ en régime streamers.



(e) $\tilde{\varepsilon} = h(\beta)$ régime flux zonaux.



(f) $\tilde{\varepsilon} = h(\beta)$ régime streamers.

FIGURE 4.5 – Erreur mesurée avec la méthode PoPe pour l'équation de quasi-neutralité. Colonne de gauche : flux zonaux ($c_1 = 0.1$, $c_2 = -0.1$, $c_3 = -3.6 \times 10^{-5}$ et $c_4 = 10^{-3}$) ; Colonne de droite : streamers ($c_1 = 0.1$, $c_2 = 0$, $c_3 = -3.6 \times 10^{-5}$ et $c_4 = 10^{-3}$). Maillage 257×257 .

4.3.2 Vérification de Vlasov : disparition des petites échelles

Les méthodes traditionnelles de vérification de code indiquent une faible erreur sur la résolution de l'équation de Vlasov : les taux de croissance linéaire sont corrects à 10^{-3} près, la conservation des trois premiers moments de la fonction de distribution est respectée à 10^{-3} près (ou mieux) sur des temps longs ($\sim 50 \omega_0^{-1}$) en utilisant des maillages ne faisant pas exploser les coûts de calcul. Cependant, l'importance de l'erreur dépend fortement du type de phénomène physique simulé : l'erreur est inférieure d'un ordre de grandeur pour le régime «flux zonaux» par rapport au régime «streamers» à discrétisation identique. L'étude de la conservation des moments de la fonction de distribution au sein du splitting temporel met en évidence le fait que $\sim 95\%$ de l'erreur vient du crochet de Poisson. La lente décroissance des modes de la fonction de distribution est considérée comme la principale raison d'une telle erreur. L'utilisation d'un filtre dans la dimension périodique permet de réduire d'un facteur $\times 2$ l'erreur absolue mais ne diminue pas le poids de l'opérateur non-linéaire dans l'erreur. L'utilisation d'un filtre passe-bas n'est responsable que de $\lesssim 5\%$ de la variation d'entropie. Les différents filtres utilisés dans la dimension non périodique n'ont pas permis d'améliorer ce résultat. L'utilisation d'hyperviscosité améliore sensiblement le résultat mais impacte la nature de la physique simulée : les forts gradients qui s'établissent naturellement sont régularisés, le transport change donc de nature. La méthode PoPe permet de retrouver la convergence en espace à l'ordre 2 mais pas la convergence en temps. Ce phénomène a été observé pour TOKAM2D : lorsque l'erreur due à la discrétisation spatiale est trop importante, il est difficile de mesurer l'erreur due à la discrétisation temporelle. L'utilisation d'un pas d'intégration temporelle adaptatif en fonction de l'intensité du champ d'advection dans le but de respecter une condition CFL n'améliore pas le résultat.

Sur la figure 4.6, l'erreur $\varepsilon = \partial_t \bar{f} - \partial_t \tilde{f}$ mesurant l'écart entre la dérivée temporelle issue d'une simulation TERESA et la dérivée temporelle «théorique» calculée par rapport à l'état du système est présentée pour $E = 0$ dans l'espace (α, ψ) . Les particules à basse énergie sont les particules qui suivent le plus le potentiel électrique car ces particules ne sont pas soumises à la dérive en E , elles sont lentes et donc non adiabatiques ; ainsi, l'erreur numérique est la plus forte pour ces particules. L'erreur atteint les 5% localement mais sa répartition dans l'espace la rend indiscernable sur des bilans comme la mesure des moments de la fonction de distribution à cause de compensations d'erreur. La variation de l'erreur par rapport à la dynamique du système $\varepsilon = h(\partial_t \bar{f})$ montre une sous-estimation des fortes variations dans le régime streamers (voir Fig. 4.6f). La méthode Semi-Lagrangienne telle qu'implémentée dans le code TERESA et utilisée sur des champs contenant de forts gradients semble donc induire une diffusion numérique importante. L'illustration utilise un maillage de 257×257 car, bien que diminuant l'erreur, l'utilisation d'un maillage plus fin augmente l'intensité des gradients en diminuant la largeur des structures, ce qui rend difficile la visualisation.

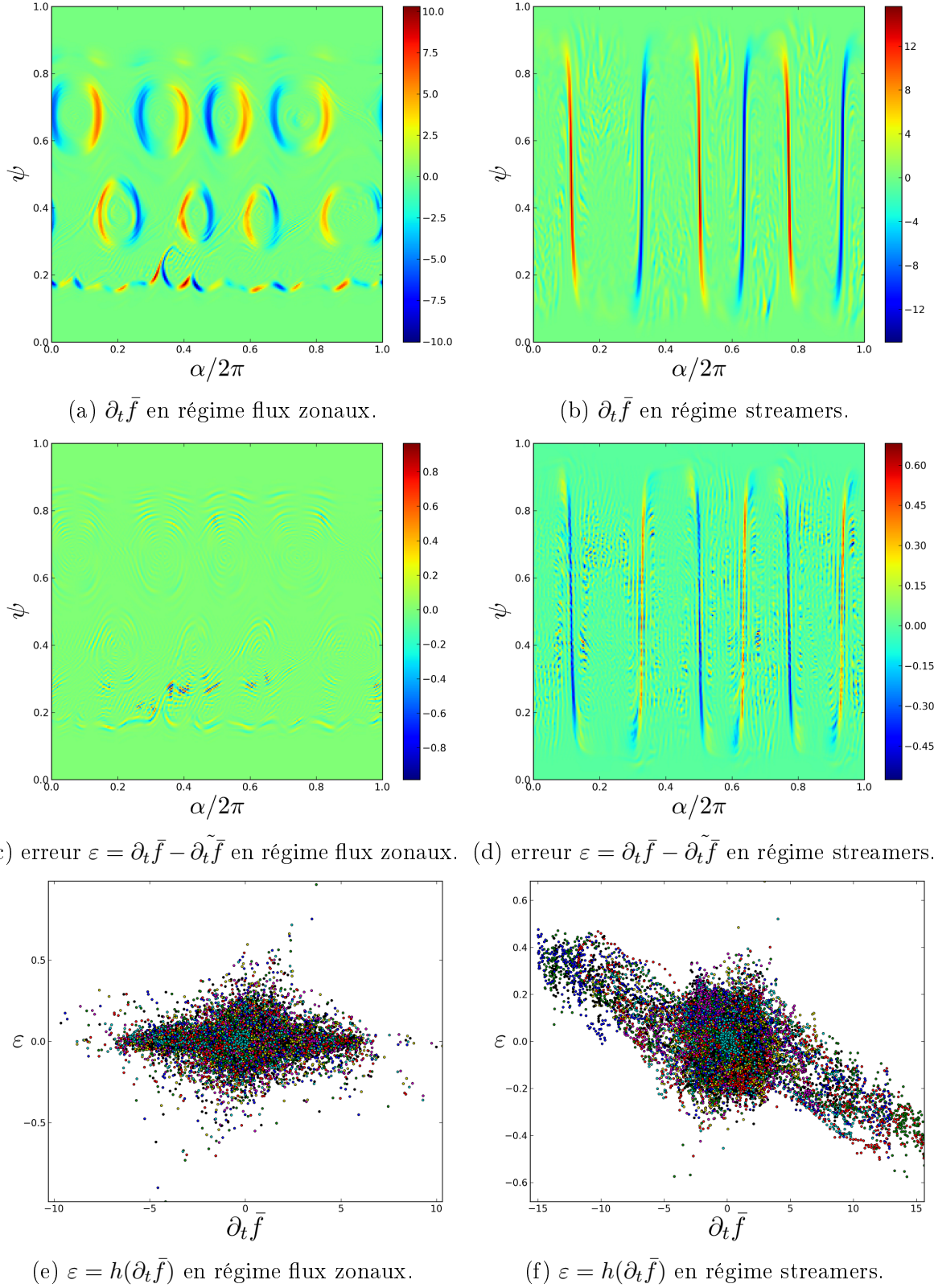


FIGURE 4.6 – Erreur mesurée avec la méthode PoPe pour l'équation de Vlasov pour $E = 0$. Colonne de gauche : flux zonaux ($\lambda = 0$), colonne de droite : streamers ($\lambda = 1$). Forçage par les bains thermiques $\Delta T = 0.3$, $\rho_c = 0.06$, $\delta_b = 0.1$, $\omega_d = 1$, maillage 257×257 .

Étude des mécanismes responsables du transport dans le code TERESA

Sommaire

5.1	Transition isolant-conducteur thermique	119
5.1.1	Définition des régimes "streamers" et "flux zonaux"	119
5.1.2	Transitoire vers les états asymptotiques avant blocage	120
5.1.3	Signature du transport dans l'espace des phases	121
5.1.4	Impact des paramètres externes	126
5.1.5	Équation de quasi-neutralité : contribution adiabatique	127
5.1.6	Erratum : aucune avalanche détectée...	130
5.1.7	Pistes de détermination de la valeur de λ	132
5.2	Processus de saturation : apparition d'avalanches	133
5.2.1	Transitions flux zonaux - streamers : étude du plan (δ_b, λ)	133
5.2.2	Forçage par les bains : transition totale	134
5.2.3	Forçage par le flux : régime intermédiaire	134
5.2.4	Utilisation d'un terme de pertes parallèles	135
5.3	Réduction fluide de simulations cinétiques	138
5.3.1	Dérivation d'une version fluide du modèle de TERESA	138
5.3.2	Contribution des termes de l'équation de Vlasov	139
5.3.3	Détection d'équations fluides dans TERESA avec PoPe	141

Une étude par simulation de la turbulence d'ions piégés dans le code TERESA est présentée dans ce chapitre. Pour des particules fortement piégées, c'est-à-dire lorsque le point de rebroussement de la trajectoire est proche du minimum du champ magnétique, les trajectoires tendent vers la limite des oscillateurs harmoniques avec une seule fréquence caractéristique. Dans cette hypothèse la quatrième dimension κ peut être réduite à une valeur et le problème réduit à 3 dimensions.

La première partie met en évidence l'existence de deux états pour ce système (voir [Cartier-Michaud 2014]), la transition étant essentiellement contrôlée par le paramètre λ introduit avec le traitement des électrons adiabatiques. La seconde partie utilise la dépendance en température des coefficients dans l'équation de quasi-neutralité pour s'écarter de ce comportement binaire. L'utilisation d'un effet de résistivité issu du transport parallèle est une seconde voie explorée. Enfin, la troisième partie est l'étude d'une réduction de ce modèle cinétique vers un modèle fluide à l'aide de la méthode PoPe.

Les résultats de ce chapitre se basent sur l'étude de plusieurs centaines de simulations numériques sélectionnées parmi plusieurs milliers en suivant des critères d'erreur numérique, c'est-à-dire vérifiant la conservation relative des moments à $\lesssim 10^{-5}$ sur une fenêtre glissante en temps d'une largeur $1\omega_0^{-1}$. Les simulations retenues utilisent les paramètres répertoriés dans les tableaux tab. D.1, tab. D.2 et tab. D.3 de l'annexe D.

5.1 Transition isolant-conducteur thermique

5.1.1 Définition des régimes "streamers" et "flux zonaux"

Les streamers présentent des structures du potentiel électrique qui sont allongées dans la direction radiale ψ alors que les flux zonaux sont associés à des structures de potentiel électrique orientées dans la direction angulaire α . Les particules chargées soumises à la vitesse de dérive électrique tendent à se déplacer le long des lignes iso-potentielles. Dans le cas streamers le transport est dans la direction radiale ce qui déconfiner le système, dans le cas des flux zonaux le transport est perpendiculaire à la direction radiale ce qui participe à un effet d'isolement thermique. Ces deux comportements sont présents dans les simulations de TERESA. Ils contrôlent l'organisation de la fonction de distribution et l'intensité du transport. Ces deux régimes sont illustrés par la carte de température de deux simulations TERESA utilisant deux valeurs du paramètre de contrôle λ , $\lambda = 0$ et $\lambda = 1$, sur la figure 5.1. Ces deux valeurs limites de λ sont également insatisfaisantes pour décrire la réponse adiabatique des électrons. En revanche, la réponse de la turbulence d'ions piégés pour ces valeurs de λ est tout à fait caractéristique.

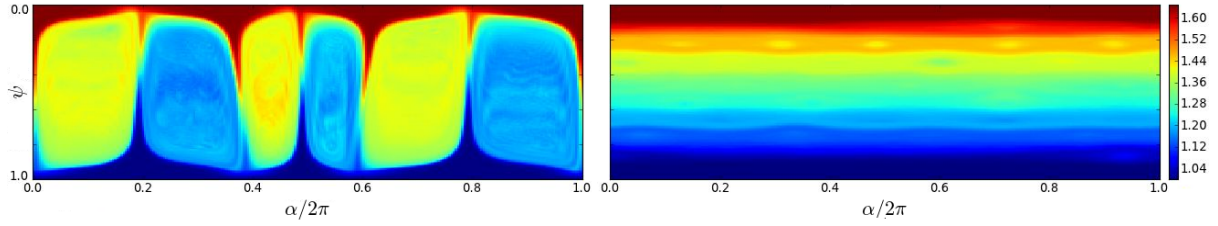


FIGURE 5.1 – Illustration de la température de deux simulations TERESA, à gauche $\lambda = 0$ régime streamers, à droite $\lambda = 1$ régime flux zonaux.

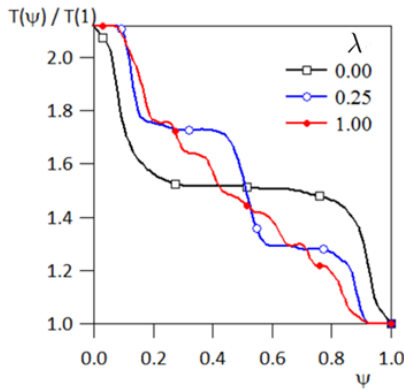


FIGURE 5.2 – Illustration de profils de température pour 3 valeurs de λ : $\lambda = 0$ (régime streamers), $\lambda = 0.25$ (régime flux zonaux) et $\lambda = 1$ (régime flux zonaux). La variation de λ permet de faire changer le nombre de marche dans le profil en forme d'«escalier» des régimes flux zonaux. Dans les trois cas, les raccords réguliers sur les bords sont dus aux zones tampons.

L'organisation streamers (pour $\lambda = 0$) rappelle l'organisation du système de Rayleigh-Bénard : de grands vortex connectent les deux bords du système et établissent un transport entre la source chaude et la source froide. L'organisation flux zonaux (pour $\lambda = 1$) génère une forte stratification de la température, des zones de gradients nuls et gradients forts dans la direction ψ se succèdent pour former un "escalier" [Dif-Pradalier 2015] (voir

Fig. 5.2). Dans le cas streamers, le transport radial est proportionnel à l'écart de température imposé aux bords de la boîte de simulation. Dans le cas flux zonaux le transport est quasiment nul, il ne dépend pas du gradient de température imposé : pour des simulations standards utilisant un faible gradient de température (proche du gradient critique), un facteur 1000 sépare le flux de chaleur des deux systèmes. La réponse des électrons au mode $k_\alpha = 0$ change totalement la nature du transport. Ces deux régimes sont les deux seuls régimes asymptotiques qui ont été observés dans les simulations de TERESA en utilisant le modèle décrit au chapitre 4.

5.1.2 Transitoire vers les états asymptotiques avant blocage

Pour étudier le comportement du système simulé par TERESA, nous introduisons trois grandeurs pour caractériser le système : le flux de chaleur dans la direction ψ , moyenné sur l'ensemble de la boîte de simulation à l'exception des zones tampons, $Q = \int \bar{f} E \partial_\alpha \bar{\Phi} d^3 v d^3 x$, la mesure de l'énergie dans l'écoulement zonal donnée par la valeur absolue de sa vitesse $\partial_\psi \langle \phi \rangle_\alpha$: $ZF = \int |\partial_\psi \langle \phi \rangle_\alpha| d\psi$ ainsi qu'une mesure de l'impact du cisaillement induit par les flux zonaux $ZF' = \int |\partial_\psi^2 \langle \phi \rangle_\alpha| d\psi$.

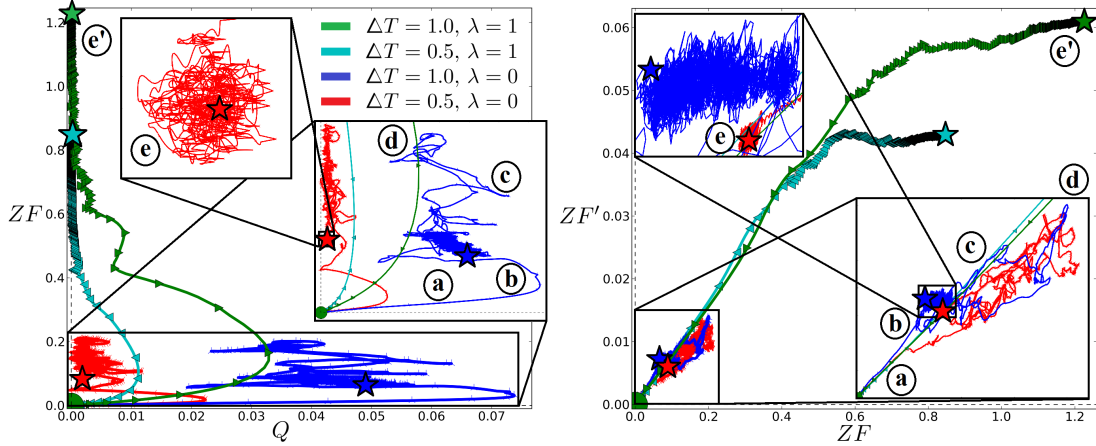


FIGURE 5.3 – Portrait de phase dans le plan flux de chaleur - flux zonaux (Q, ZF) et flux zonaux - cisaillement des flux zonaux (ZF, ZF') : 5 états successifs sont labellés a,b,c,d,e. Courbes bleue et rouge : $\lambda = 0$, verte et cyan : $\lambda = 1$. Courbes bleue et verte : fort écart de température ($\Delta T = 1.0$), rouge et cyan : faible écart de température ($\Delta T = 0.5$).

La chronologie d'une simulation TERESA peut être résumée en 5 étapes (voir Fig. 5.3) avec 2 issues possibles selon la forme de la réponse des particules adiabatiques $\lambda = 0$ (régime streamers : fort transport) ou $\lambda = 1$ (régime flux zonaux : forte isolation) :

- Phase linéaire : des structures de type streamers se développent mettant en évidence le mode le plus instable déterminé par l'analyse linéaire, donc en fonction des fréquences et grandeurs caractéristiques ω_d , ρ_c et δ_b . Le flux de chaleur croît de façon exponentielle.
- Saturation non linéaire : le flux de chaleur atteint sa valeur maximale alors que l'amplitude des flux zonaux (l'intensité de ZF et ZF') augmente.

- c) Phase de relaxation : une dynamique rapide et d'apparence chaotique se met en place avec une forte interaction streamers - flux zonaux. L'instabilité de Kelvin-Helmholtz joue un rôle important dans les échanges d'énergie entre ces deux types de structures orthogonales dans l'espace [Palermo 2015]. Cette étape est la plus contraignante d'un point de vue numérique en raison des forts gradients de la fonction de distribution qui se développent dans les deux dimensions α et ψ ainsi que la rapidité de la dynamique.
- d) Phase de bifurcation : Lorsque la dynamique ralentit, le système évolue vers un régime dominé par des flux zonaux ou un régime dominé par des streamers. Pour certains jeux de paramètres, cette étape peut être longue (20 fois le temps de croissance linéaire) avec un apparent blocage dans un régime dominé par des streamers avant de bifurquer dans le régime dominé par des flux zonaux.
- e) Phase dominée par des streamers ou e') phase dominée par des flux zonaux. Une diminution du nombre de streamers peut s'opérer sur des temps longs, sans changer la nature du régime. Dans les deux cas, une très lente dérive des grandeurs Q , ZF et ZF' reste mesurable.

5.1.3 Signature du transport dans l'espace des phases

Même si les grandeurs qui nous intéressent, transport de densité ou chaleur, sont exprimables dans un modèle de nature fluide, l'utilisation d'un modèle de nature cinétique tel que TERESA ne doit pas se réduire à simplement utiliser l'espace des vitesses pour déterminer plus précisément la dynamique des moments fluides : l'étude de l'espace des vitesses permet de mieux comprendre les contraintes numériques et la richesse physique des processus de transport. Afin d'étudier le transport dans le plan énergie - temps (E, t) , trois flux sont définis :

$$\gamma_{P,\alpha}(E, t) = \frac{2}{L_\alpha L_\psi \sqrt{\pi}} \int E \omega_D \bar{f} j_E(E) j_\kappa(\kappa) d\kappa d\psi d\alpha \quad (5.1)$$

$$\gamma_{\phi,\alpha}(E, t) = \frac{2}{L_\alpha L_\psi \sqrt{\pi}} \int \partial_\psi \bar{\Phi} \bar{f} j_E(E) j_\kappa(\kappa) d\kappa d\psi d\alpha \quad (5.2)$$

$$\gamma_{\phi,\psi}(E, t) = \frac{2}{L_\alpha L_\psi \sqrt{\pi}} \int \partial_\alpha \bar{\Phi} \bar{f} j_E(E) j_\kappa(\kappa) d\kappa d\psi d\alpha \quad (5.3)$$

avec $j_E(E)$ et $j_\kappa(\kappa)$ les jacobiens en énergie et profondeur de piégeage utilisés pour intégrer l'espace des vitesses. Une simple somme en énergie de ces trois flux, sans ajout de jacobiens, permet de déterminer pour le deuxième moment de la fonction de distribution (équivalent à la pression pour le modèle rebond) :

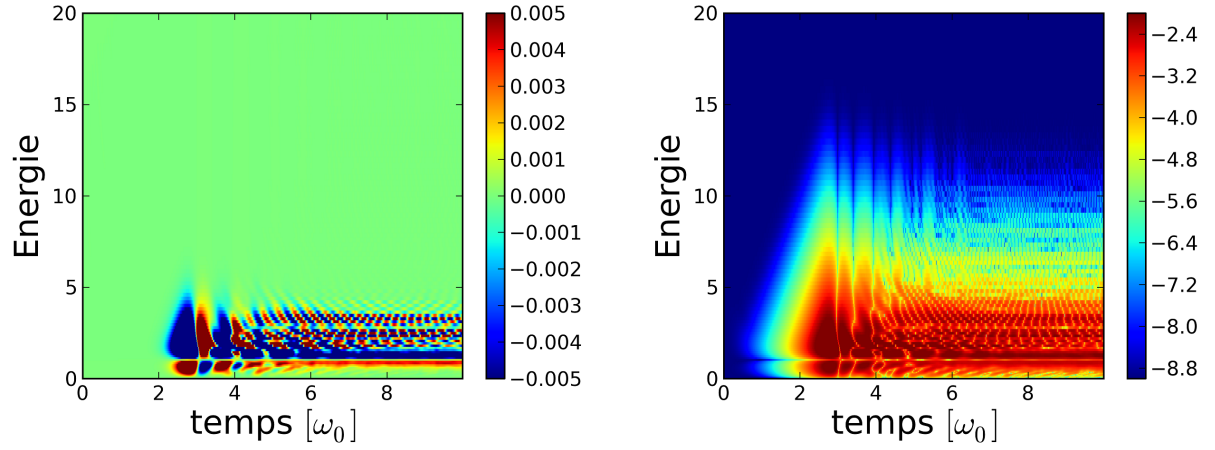
- le flux induit par la dérive de précession dans la dimension α : $\Gamma_{P,\alpha}(t) = \int \gamma_{P,\alpha}(E, t) dE$,
- le flux induit par la dérive électrique dans la dimension α : $\Gamma_{\phi,\alpha}(t) = \int \gamma_{\phi,\alpha}(E, t) dE$,
- et le flux induit par la dérive électrique dans la dimension ψ : $\Gamma_{\phi,\psi}(t) = \int \gamma_{\phi,\psi}(E, t) dE$.

Ainsi, les flux eq.(5.1,5.2,5.3) permettent de mesurer quelle classe de particule contribue au transport en moyenne. L'intensité du flux $\gamma_{P,\alpha}(E, t)$ est supérieure de un à deux

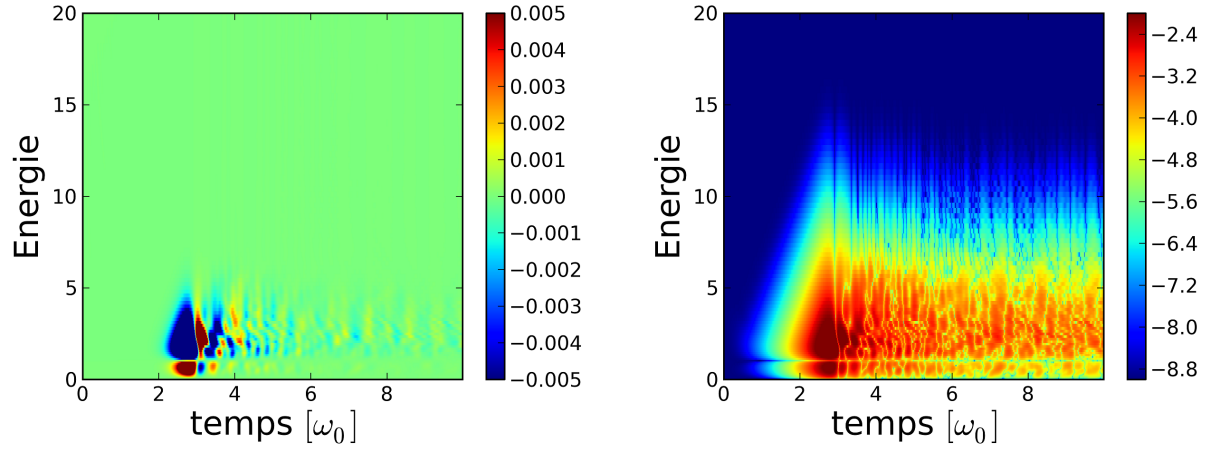
ordres de grandeurs par rapport aux flux turbulents pour un jeu de paramètres standard. De plus, le flux généré par l'advection linéaire est quasiment constant au cours du temps pour un forçage par les bains thermiques, que le système soit sujet à des streamers ou à des flux zonaux. Ce flux est constant car la précession advecte l'ensemble de la fonction de distribution, or la réorganisation impacte la répartition de la fonction de distribution dans l'espace, mais n'impacte que peu la quantité totale présente à chaque instant dans le domaine de simulation.

Les flux turbulents dans les deux directions varient de façon importante selon le régime de la simulation. La figure 5.4 illustre l'organisation et l'intensité du flux turbulent dans la direction radiale sur une période de temps suffisamment longue pour voir la bifurcation vers un des deux régimes possibles. La relaxation en fin de phase linéaire ($t \simeq [2 \omega_0^{-1}, 3 \omega_0^{-1}]$) est comparable dans les deux régimes. La bifurcation est définitive à partir de $t \gtrsim 4\omega_0^{-1}$, l'intensité du transport chute dans le cas flux zonaux alors qu'elle est maintenue dans le cas streamers (aussi visible sur Fig. 5.6). La direction du transport dans le cas streamers n'est pas uniforme en énergie, les particules à basses énergies ($E \leq 1$) se déplacent du point froid vers le point chaud (couleur rouge), une classe intermédiaire de particules ($E \in [1, 2]$) se déplace du point chaud vers le point froid (couleur bleue), une troisième classe de particules ($E \in [2, 5]$) alterne la direction de son transport, les autres tendent à alterner tellement rapidement et avec des intensités tellement faibles qu'elles ne participent plus au transport. Le transport en régime flux zonaux alterne au cours du temps à mesure qu'il décroît. L'alternance de la direction du transport en fonction de l'énergie des particules permet de conserver naturellement le premier moment et de transporter les moments d'ordre supérieur. Le transport résultant de l'intégration en énergie E est près d'un ordre de grandeur inférieur aux flux maximum et minimum mesurables dans le plan (E, t) : la dynamique cinétique est plus riche et intense que la dynamique des premiers moments fluides.

L'analyse du flux turbulent dans la direction perpendiculaire au rayon (voir Fig. 5.5) se rapproche de la direction radiale à ceci près que ce sont maintenant les streamers qui ne sont pas efficaces pour transporter alors que les flux zonaux le sont. Les fines structures présentes en régimes streamers pour $E \in [2, 5]$ ne sont désormais plus présentes. Le transport radial dans le cas flux zonaux est essentiellement déterminé par deux classes de particules : pour $E \in [0, 1]$ les particules s'opposent à la direction de l'advection linéaire (couleur bleue), pour $E \in [1, 5]$ les particules se déplacent dans la même direction que le flux advectif (couleur rouge).

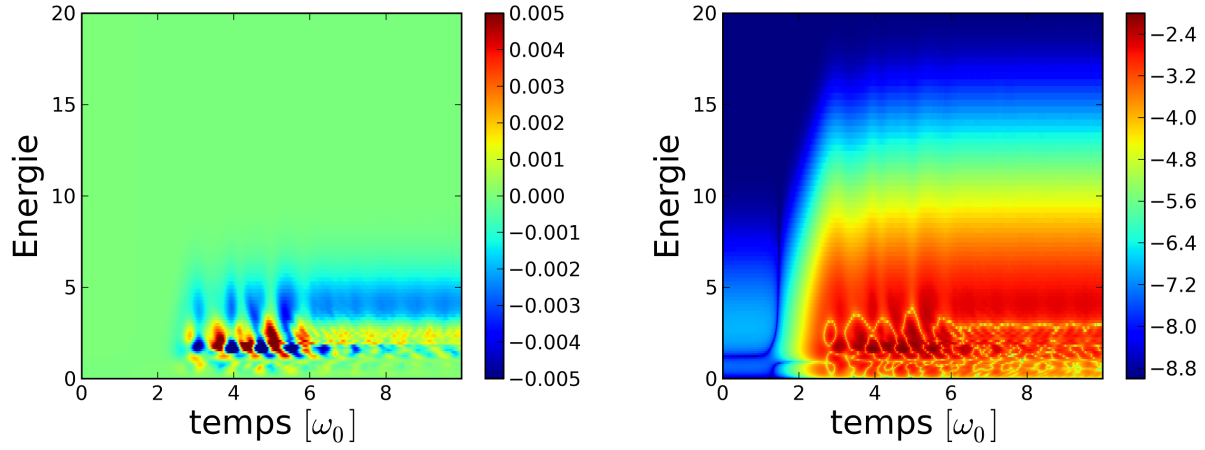


(a) Simulation "Streamers" ($\lambda = 0$). $\gamma_{\phi,\psi}$ en échelle linéaire resserrée sur 0 et logarithmique.

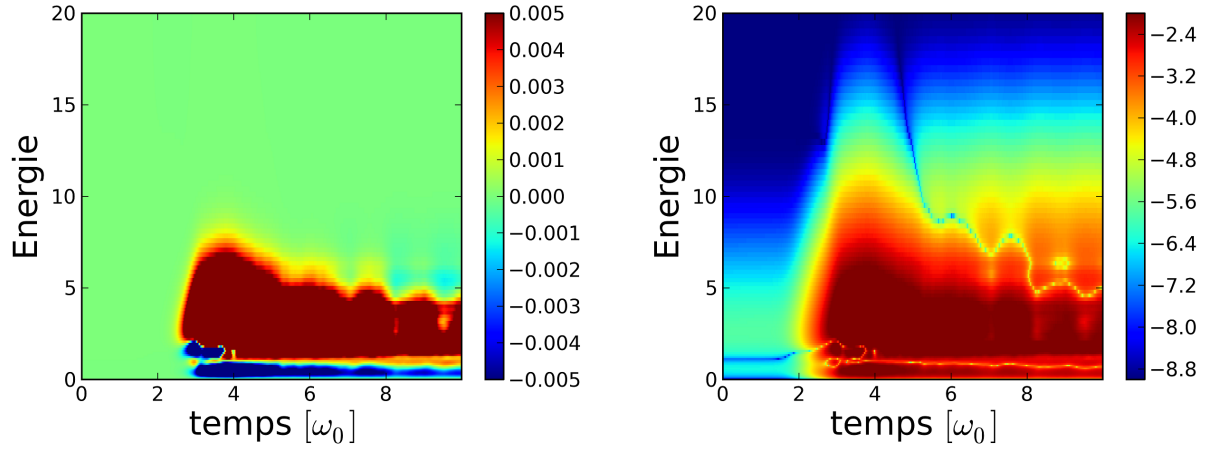


(b) Simulation "Flux zonaux" ($\lambda = 1$). $\gamma_{\phi,\psi}$ en échelle linéaire resserrée sur 0 et logarithmique.

FIGURE 5.4 – Illustrations dans le plan énergie-temps du flux $\gamma_{\phi,\psi}$ pour une simulation en régime steamer (Fig. 5.4a) et en régime flux zonaux (Fig. 5.4b). Colonne de gauche, échelle de couleurs linéaire centrée en 0 pour mettre en évidence les changements de signe des flux. Colonne de droite, coloration en échelle logarithmique pour mettre en évidence l'intensité des flux.



(a) Simulation "Streamers" ($\lambda = 0$). $\gamma_{\phi,\alpha}$ en échelle linéaire resserrée sur 0 et logarithmique.



(b) Simulation "Flux zonaux" ($\lambda = 1$). $\gamma_{\phi,\alpha}$ en échelle linéaire resserrée sur 0 et logarithmique.

FIGURE 5.5 – Illustrations dans le plan énergie-temps du flux $\gamma_{\phi,\alpha}$ pour une simulation en régime steamer (Fig. 5.5a) et en régime flux zonaux (Fig. 5.5b). Colonne de gauche, échelle de couleurs linéaire une coloration linéaire centrée en 0 pour mettre en évidence les changements de signe des flux. Colonne de droite, échelle de couleurs logarithmique pour mettre en évidence l'intensité des flux.

Les différentes séparations observées pour $E \simeq 1$ s'explique naturellement par l'inversion du gradient en $\partial_\psi \bar{f}$. Soit la fonction d'équilibre (simplifiée par l'hypothèse $\partial_\psi n_{eq} = 0$) et le gradient d'équilibre :

$$\bar{f}_{eq}(\psi) = \left(\frac{3}{2}\right)^{3/2} \frac{n_{eq}}{T_{eq}(\psi)^{3/2}} e^{-\frac{3}{2} \frac{E}{T_{eq}(\psi)}} \quad (5.4)$$

$$\partial_\psi \bar{f}_{eq}(\psi) = \frac{3}{2} \bar{f}_{eq} \frac{\partial_\psi T_{eq}(\psi)}{T_{eq}(\psi)} \left(\frac{E}{T_{eq}(\psi)} - 1 \right) \quad (5.5)$$

La dérivée radiale du profil d'équilibre (eq.(5.5)) change de signe pour un seuil déterminé par la température en première approximation. Concrètement, dans la fonction de distribution, la forme d'escalier observée Fig. 5.2 se transforme en un escalier montant ou un escalier descendant dans la fonction de distribution, selon le niveau d'énergie considéré. Enfin l'intégrale dans l'espace réel de ce motif multiplié par les oscillations régulières de la dérivée du champ électrique impose une direction privilégiée au flux. Les flux de pression $\Gamma_{\phi,\alpha}(t)$ (trait discontinu) et $\Gamma_{\phi,\psi}(t)$ (trait continu) sont illustrés sur la figure 5.6 pour les deux simulations streamers (courbes rouges) et flux zonaux (courbes bleues). Le début de la phase stationnaire non linéaire montre un amortissement des oscillations centrées en 0 pour le régime flux zonaux. Sur des temps plus longs, le transport moyenné en temps pour le régime flux zonaux est de deux ordres de grandeur inférieur au transport en régime streamers.

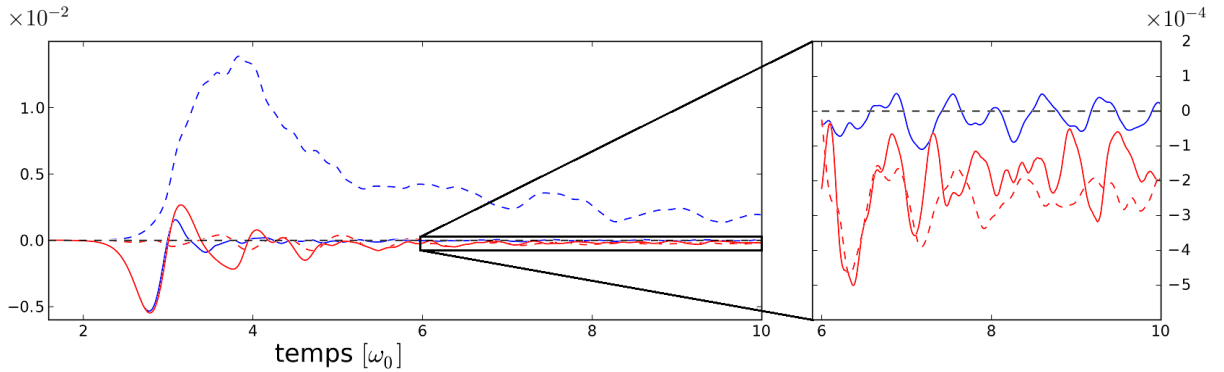


FIGURE 5.6 – Illustration des flux turbulents $\Gamma_{\phi,\alpha}(t)$ (courbes discontinues) $\Gamma_{\phi,\psi}(t)$ (courbes continues) pour une simulation en régime streamers (courbes rouges) et en régime flux zonaux (courbes bleues). Un zoom est effectué sur le début de la phase stationnaire non-linéaire.

La discrétisation fine de la dimension E aux basses énergies est motivée par la richesse de la dynamique dans cette région. La nécessité de décrire des fortes valeurs de E n'est pas motivée par l'impact du transport aux hautes énergies mais simplement par le calcul de la densité de particules issu de l'intégrale de la fonction de distribution dans l'équation de quasi-neutralité. Cette intégrale en énergie est théoriquement faite jusqu'à l'infini. L'utilisation d'une valeur maximale d'énergie finie impacte le taux de croissance en phase linéaire. L'impact en phase non linéaire se réduit à éviter une polarisation du plasma en évitant de commettre des erreurs sur le calcul de la densité.

5.1.4 Impact des paramètres externes

L'ensemble des paramètres utilisés pour caractériser le système est divisé en deux : les paramètres considérés comme "externes" et ceux "internes". La première catégorie est composée de l'écart de température imposé sur les bords de la boîte de simulation ΔT en forçage par les bains thermiques (Thermal Bath TB), l'amplitude de la source en forçage par le flux (Flux Driven FD), S_0 , ou l'amplitude de la perturbation initialisant la turbulence, ε . L'influence de ces trois paramètres vis à vis de la bifurcation entre les deux états flux zonaux - streamers a été étudiée. Les valeurs utilisées sont reportées dans le tableau tab. 5.1. La valeur des paramètres manquants est reporté dans les tableaux dans l'annexe D.

Paramètres	ΔT	S_0	ε
Valeurs de référence	0.5	TB	10^{-4}
Intervalles	[0.125 : 2]	TB/FD [0 : 1]	$[10^{-6} : 10^{-2}]$

TABLE 5.1 – Paramètres de contrôle externes : intervalles étudiés.

Augmenter le différentiel de température entre les deux bords de la boîte (les bains thermiques) a pour effet d'augmenter l'écart d'amplitude entre les modes les plus instables et le reste du bain de modes perturbés en début de phase linéaire : le spectre du système en fin de phase linéaire est alors largement dominé par un petit nombre de modes qui contribueront de façon quasi exclusive à la relaxation non-linéaire. Utiliser une perturbation initiale de faible amplitude amplifie l'écart d'amplitude entre les modes en fin de phase linéaire. Plus le nombre de modes contribuant significativement à la phase de relaxation est faible, moins cette phase est chaotique, plus sa durée est faible et son issue certaine. Utiliser un forçage par le flux n'impacte pas le système sur des échelles aussi courtes que la première phase de relaxation. Ainsi pour des valeurs de $\lambda = 0$ ou $\lambda = 1$, l'état final streamers ou flux zonaux n'est pas modifié par les trois paramètres externes. Cette séparation est marginalement impactée par les paramètres externes pour certaines valeurs critiques λ .

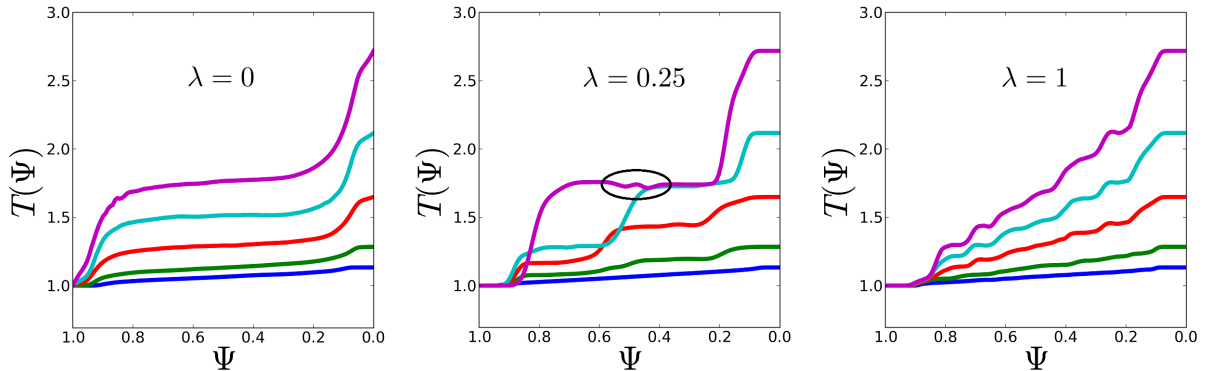


FIGURE 5.7 – Profils de température pour 5 intensités du forçage par les bains thermiques : $\Delta T = (0.125 \ 0.250 \ 0.500 \ 1.00 \ 1.500)$ et pour 3 valeurs de $\lambda = (0.00 \ 0.25 \ 1.00)$.

La figure 5.7 montre des profils moyens de température pour différents ΔT et λ . Le régime streamers $\lambda = 0$ est caractérisé par un unique plateau dans le centre de la boîte et deux raccords dans les zones tampons sur les bords. Le flux turbulent se transformant en flux diffusif dans les zones tampons, la mesure des gradients en leur sein estime l'efficacité du transport qui augmente avec le niveau de déstabilisation. Le régime flux-zonaux $\lambda = 1$ est caractérisé par une multitude de plateaux dont le premier et le dernier se trouvent dans les zones tampons : aucun transport n'est établi avec l'extérieur de la boîte de simulation. La position et le nombre des marches n'est pas impacté par le forçage, seulement la hauteur des marches l'est. La valeur intermédiaire $\lambda = 0.25$ montre un régime flux zonaux avec un nombre de marches inférieur au cas $\lambda = 1$: un nombre différent de marches peut apparaître dans les profils de température en fonction de λ . Sur la même série de figures, on peut voir que le gradient de température n'impacte pas l'organisation du système, même pour le plus fort gradient. Une visualisation dans le plan (α, ψ) du profil $\lambda = 0.25$ et $\Delta T = 1.5$ met en évidence l'existence d'une marche au niveau du cercle noir pour le champ de densité et de pression, même si la discontinuité au niveau du profil de température n'est pas parfaitement visible.

L'impact du forçage par le flux, sur des temps plus longs, ne permet pas non plus de basculer d'un régime flux zonaux à un régime streamers. La source augmente localement la température jusqu'à établir des gradients que les méthodes numériques ne peuvent pas supporter.

5.1.5 Équation de quasi-neutralité : contribution adiabatique

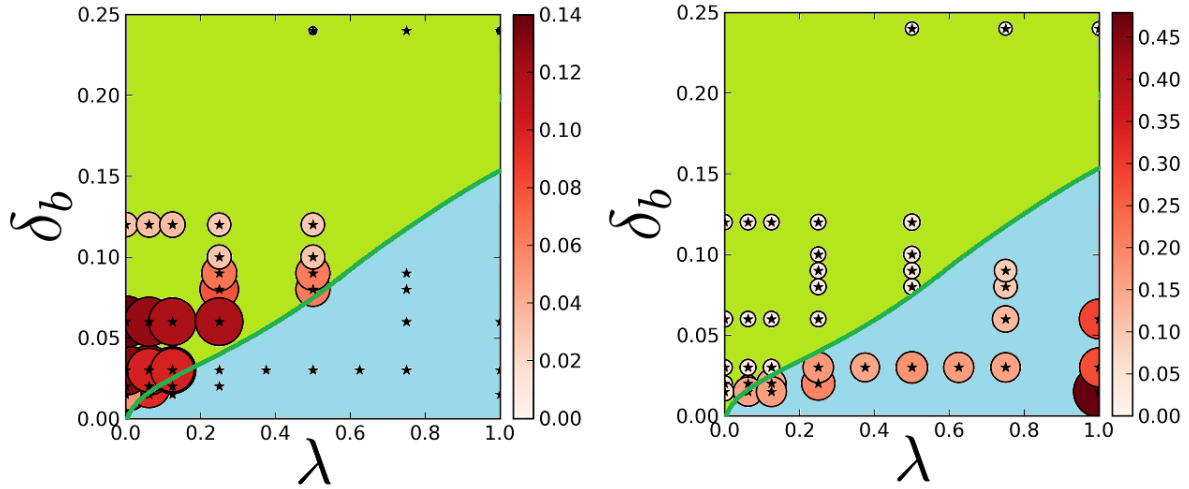
Les paramètres dit internes, la seconde catégorie, sont la fréquence de précession ω_d , les grandeurs caractéristiques ρ_c et δ_b ainsi que le paramètre λ qui détermine la réponse des particules adiabatiques. Les valeurs utilisées sont reportées dans le tableau tab. 5.2. Pour la valeur des autres paramètres, se reporter aux tableaux dans l'annexe D.

Paramètres	λ	ρ_c	δ_b	ω_d
Valeurs de référence	1	0.06	0.03	1
Intervalles	[0 : 1]	[0.0003 : 0.12]	[0.003 : 0.12]	[0.1 : 1]

TABLE 5.2 – Paramètres de contrôle internes : intervalles étudiés.

La fréquence de précession typique ω_d influence la phase linéaire mais n'impacte pas la partition flux zonaux - streamers, de la même façon que les paramètres externes. Le paramètre ρ_c modifie aussi la relation de dispersion en changeant le nombre d'onde du mode le plus instable. La partition n'est pas impactée mais le nombre de structures dans la dimension α est directement lié à ce paramètre. En forçage par les bains thermiques, les températures sur les bords étant fixes, le flux est directement proportionnel au nombre de cellules streamers. Le paramètre ρ_c contrôle donc l'intensité du transport lorsque le système n'est pas en régime flux zonaux. Cette intensité étant proportionnelle au nombre de streamers, elle prend des valeurs discrètes dont le quantum est l'efficacité du transport d'un dipole streamers (deux cellules).

Les deux seuls paramètres qui ont un impact clair sur le régime du système sont δ_b et λ . Le premier contrôle un effet de taille de boîte connu dans la littérature de Rayleigh-Bénard : si un rouleau est assez grand pour mettre en contact le bord chaud et le bord froid de la boîte de simulation (dans la direction radiale ψ , donc de type streamers), alors le transport ne passe que par un seul vortex et non une série de vortex, ce qui rend le transport très efficace. Une telle dépendance est retrouvée pour le système TERESA en changeant la taille caractéristique dans la direction ψ , la largeur banane δ_b . Sur la figure 5.8a, dans un plan (λ, δ_b) , l'intensité du flux turbulent dans la direction radiale est représentée en variant la couleur et le rayon de cercles. Les étoiles matérialisent les simulations dans le cas où le flux est trop faible pour être visible sous forme d'un cercle. Le régime streamers est donc représenté par les cercles entourant une étoile et le régime flux zonal par les étoiles seules (flux quasi-nul). La courbe verte, obtenue empiriquement à partir d'une large base de simulations, sépare le plan (λ, δ_b) en deux zones : une région streamers (en vert) et une région flux-zonaux (bleu clair). Pour plusieurs valeurs de δ_b la recherche d'un λ critique, à la frontière des deux régimes, a été effectuée pour estimer la continuité de la partition flux zonal - streamers en gardant le reste des paramètres constants. Ainsi, en plusieurs endroits du plan (δ_b, λ) , une variation de λ à $\pm 10^{-3}$ près change la nature du transport de façon déterministe, le système est extrêmement raide.



(a) Transport turbulent radial $\Gamma_{\phi,\psi}(\lambda, \delta_b)$. (b) Importance du mode $\hat{\Phi}_{k_\alpha=0} : ZF(\lambda, \delta_b)$.

FIGURE 5.8 – Illustrations dans le plan (λ, δ_b) du flux turbulent dans la direction radiale ainsi que de l'importance du mode $k_\alpha = 0$ du potentiel électrique. Chaque étoile est associée à une simulation. Le rayon du cercle qui l'entoure et l'intensité de sa couleur sont proportionnels à l'intensité de la grandeur considérée. La courbe verte empirique partage l'espace en deux : une région streamers (vert clair) et une région flux zonal (bleu clair).

Sur la figure 5.8b, avec la même symbolique que précédemment, l'importance du mode $k_\alpha = 0$ dans le potentiel électrique est illustrée par la grandeur $ZF = \int |\partial_\psi \langle \Phi \rangle_\alpha| d\psi$. Même si l'exclusion n'est pas totale, la présence d'un fort flux turbulent est associée à un mode k_α moins important qu'en régime flux zonal. Les deux paramètres étudiés

conditionnent directement l'équation du mode $\hat{\Phi}_{k_\alpha=0}$ dans l'équation de quasi-neutralité (eq.(4.14)) :

$$C_e(\Phi - \lambda < \Phi >_\alpha) - C_i \Delta_{\rho_c, \delta_b} \Phi = \frac{2}{\sqrt{\pi} n_{eq}(\psi)} \int_0^{1^-} j_\kappa(\kappa) d\kappa \int_0^{+\infty} j_E(E) dE \bar{f} - 1$$

$$(C_e(1 - \lambda) - C_i \delta_b^2 \partial_\psi^2) \hat{\Phi}_{k_\alpha=0}(\psi) = \frac{2}{\sqrt{\pi} n_{eq}(\psi)} \delta \bar{n}(\psi)_{k_\alpha=0} \quad (5.6)$$

$$(A - B \partial_\psi^2) \hat{\Phi}_{k_\alpha=0}(\psi) = \frac{2}{\sqrt{\pi} n_{eq}(\psi)} \delta \bar{n}(\psi)_{k_\alpha=0} \quad (5.7)$$

Il est à noter que le cas $\lambda = 1$ ($\Leftrightarrow A = 0$) est singulier, l'équation du mode 0 change de nature. De manière générale, la relation $(k_\psi \delta_b)^2 \ll 1$ est respectée de sorte que A l'emporte sur B , sauf pour $A \ll 1$. L'étude de l'impact des paramètres C_i et C_e , au travers des paramètres A et B (eq.(5.7)), met en évidence des comportements tout à fait similaires à la variation des paramètres λ δ_b . Cela signifie que l'impact de δ_b sur l'organisation du système est plus important dans le membre de gauche de la quasi-neutralité que dans le membre de droite de cette même équation au travers de la moyenne rebond (\bar{n}), ou directement dans l'utilisation de la moyenne rebond pour déterminer $\bar{\Phi}$ dans l'équation de Vlasov. Ceci est en accord avec le faible impact du choix de la méthode numérique associée à l'opérateur de moyenne rebond. Les paramètres A et B de l'équation du mode $\hat{\Phi}_{k_\alpha=0}(\psi)$ (eq.(5.7)) déterminent donc le régime streamers ou flux zonaux avec une faible marge d'erreur. Dans le cas flux zonaux, le nombre de marches est aussi directement lié à cette équation. Lorsque le système est restreint aux modes $-1, 0$ et 1 dans la direction α en utilisant un filtre pour forcer à zéro les autres modes, la bifurcation est toujours observée (voir Fig. 5.9). Dans le cas streamers, le mode 0 est d'une amplitude 0.1 alors que les modes -1 et 1 sont d'amplitude 1 ; dans le cas flux zonaux, c'est le mode 0 qui est d'amplitude 1 et les modes -1 et 1 sont d'amplitude 0.1. Malgré cette information permettant de réduire le nombre de degrés de liberté dans le système, les études analytiques entreprises pour expliquer la bifurcation entre les deux régimes n'ont pas abouti pour l'instant. Le processus de bifurcation est fortement non linéaire ce qui limite les outils analytiques utilisables.

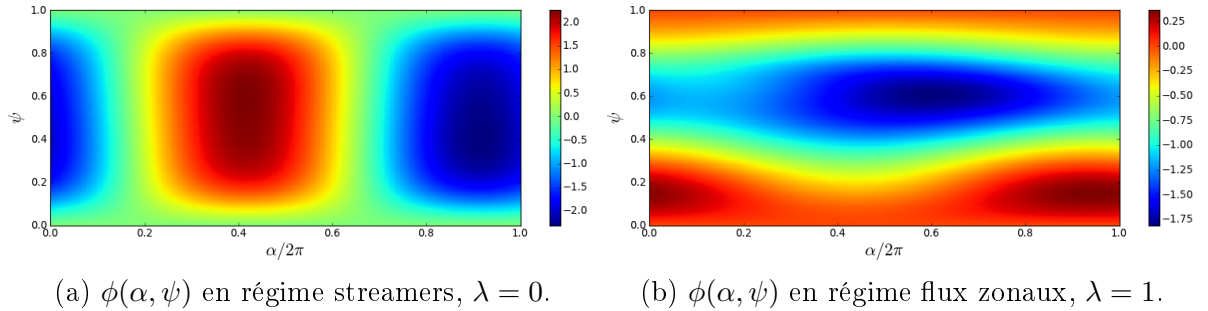


FIGURE 5.9 – Illustrations du potentiel électrique de deux simulations dont tous les modes en α , à l'exception des modes $-1, 0$ et 1 , sont forcés à zéro. Cette réduction ne fait pas disparaître la partition régime streamers - régime flux zonaux. Les autres paramètres sont standards, voir D.

L'impact des conditions aux bords du potentiel électrique est significatif car il change essentiellement la forme du potentiel moyen. L'utilisation des conditions de Dirichlet sur les deux bords impose un retour à 0 du potentiel sur le bord interne : le gradient moyen du potentiel électrique est donc nul, le potentiel se tord pour s'annuler sur le bord ce qui cause la formation d'une barrière de cisaillement supplémentaire. L'utilisation d'une condition de Neumann dans le bord interne relâche donc deux contraintes : d'une part l'établissement d'un (léger) gradient moyen de potentiel (mode $k_\alpha = 0$) permet d'augmenter la vitesse de dérive dans la direction ψ , ce qui dans la littérature est considéré comme un effet confinant, d'autre part, la disparition de la forte variation du potentiel sur le bord interne fait disparaître une zone de fort cisaillement qui avait un fort pouvoir confinant. La combinaison de ces deux effets déplace la transition streamers - flux zonaux vers des valeurs de λ plus proches de 1 et des valeurs de δ_b plus faibles.

D'une façon générale, la nature de la quasi-neutralité aura tendance à augmenter les erreurs présentes dans le membre de droite en les étalant. Si l'équation de Vlasov est mal résolue, que de la matière disparaît ou apparaît même sous la forme d'un Dirac, l'équation de quasi-neutralité répartira cette erreur sur l'ensemble du potentiel à cause de la dérivée seconde du potentiel. L'utilisation de la renormalisation de n_{eq} (le profil de densité utilisé pour définir la densité de polarisation et de la réponse adiabatique) permet d'éviter une lente polarisation du plasma à cause des erreurs numériques de l'équation de Vlasov. L'impact en terme de physique est visible dans les phases e) et e') car la dérive des grandeurs Q , ZF et ZF' ralentit, voire stoppe. L'utilisation d'une condition de Neumann pour déterminer le potentiel électrique est extrêmement sensible à la polarisation qui sera essentiellement transcrite sous forme d'un fort gradient moyen de potentiel. L'utilisation de la renormalisation de n_{eq} est ici indispensable même si la méthode n'est pas parfaite : la renormalisation est globale ce qui impacte donc le système dans sa globalité alors que l'erreur peut être très locale. Cette approche reste suffisante dans le cas de petites erreurs.

5.1.6 Erratum : aucune avalanche détectée...

Une bibliographie grandissante autour des phénomènes d'avalanches ou d'intermittence en physique des plasmas se développe depuis les années 90 [Diamond 1995, Carreras 1996, Garbet 1998, Sarazin 1998, Garcia 2006, Garcia 2013]. Essentiellement, un mécanisme de barrière interrompt le transport d'une grandeur. Lorsque l'accumulation de cette grandeur dépasse un certain seuil, la barrière cède, le transport se rétablit et le réservoir, moteur de l'instabilité, se vide jusqu'à ne plus pouvoir maintenir le caractère instable du système. Le modèle proie prédateur se prête bien à la description de tels cycles [Floriani 2013]. Le modèle TERESA semble disposer des éléments pour être potentiellement sujet à ce phénomène de relaxation. Cependant, malgré tous les efforts consentis, aucune avalanche ne fut détectée dans mes simulations lorsque les méthodes numériques n'étaient pas prises en défaut (voir l'illustration d'une avalanche dans TERESA figure 5.10).

Ce résultat est en contradiction avec les résultats de Guillaume Darmet [Darmet 2006] qui avait détecté une telle intermittence dans des simulations du même modèle (voir Fig. 5.11). En essayant de reproduire ce résultat, j'ai rencontré la difficulté théorique suivante : les avalanches ne se produisent qu'en forçage par le flux, en utilisant une source générant des valeurs négatives de la fonction de distribution, et lorsque de forts gradients sont présents dans le système, gradients tellement forts qu'ils entraînent une accumulation d'erreurs numériques en phase non linéaire.

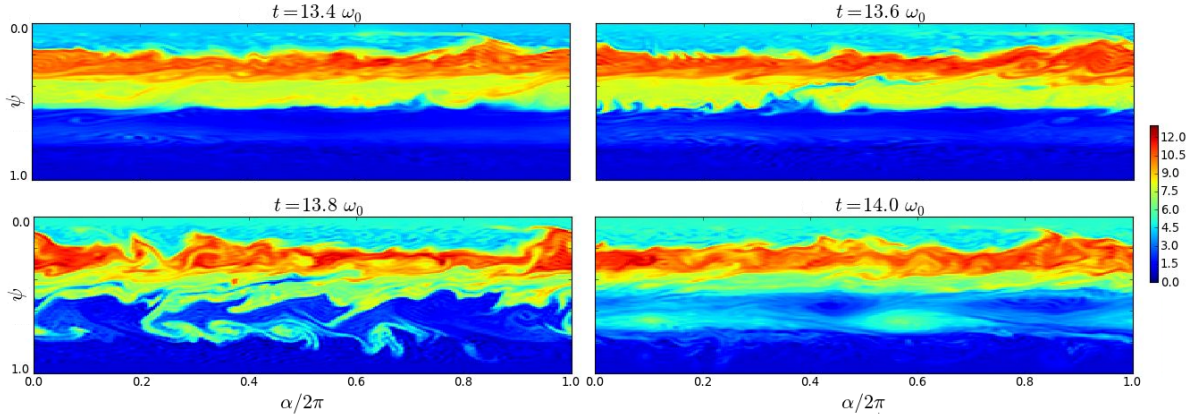


FIGURE 5.10 – Illustration d'une relaxation du profil de température. Les gradients locaux dépassent 100. L'erreur numérique mesurée sur les conservations et avec PoPe croît de façon importante lors des relaxations.

La forme de la source utilisée par Guillaume Darmet (basée sur des polynômes de Hermite [Darmet 2006]) ne permettait pas de chauffer à de hautes températures sans générer des valeurs fortement négatives dans la fonction de distribution. Ainsi, en respectant la condition $\tilde{f} \geq 0$ une limite sur l'intensité maximale du gradient de température existe. Dans ces conditions aucune avalanche ne se produit et l'erreur numérique reste acceptable. Utiliser un gradient de température initial plus élevé pour se trouver plus proche du seuil de déclenchement des avalanches ne change rien.

L'utilisation de valeurs négatives dans la fonction de distribution été assumée par Guillaume Darmet en utilisant une fonction de distribution dite de background f_{bg} pour corriger la fonction f contenant des valeurs négatives : $f_{cor} = \frac{f + \Lambda f_{bg}}{1 + \Lambda}$. La variable $f_{bg} = \frac{n_0}{T_0} e^{-E/T_0}$ est une solution triviale du système car invariante au cours du temps et dans l'espace. Cette redéfinition de la fonction de distribution en post-traitement conduit de fait à renormaliser l'amplitude de la source ainsi que les paramètres C_e et C_i de l'équation de quasi-neutralité d'un facteur $1/(1 + \Lambda)$. Pour les valeurs de paramètres utilisées dans les simulations concernées, cela conduit à changer le taux de croissance du mode le plus instable d'un facteur $\times(\Lambda + 1) = 4$ et la plage de modes instables d'un facteur proche de $\times 2$. Cela correspond donc à un changement fort de dynamique : le système effectif est très instable ce qui aurait dû conduire à utiliser un maillage fin et un pas d'intégration court. Cela n'a pas été fait sur le code de simulation de l'époque. Les simulations utilisant une renormalisation des C_i et C_e mais avec une discrétisation adaptée n'ont pas permis de retrouver des avalanches avec la version actuelle de TERESA.

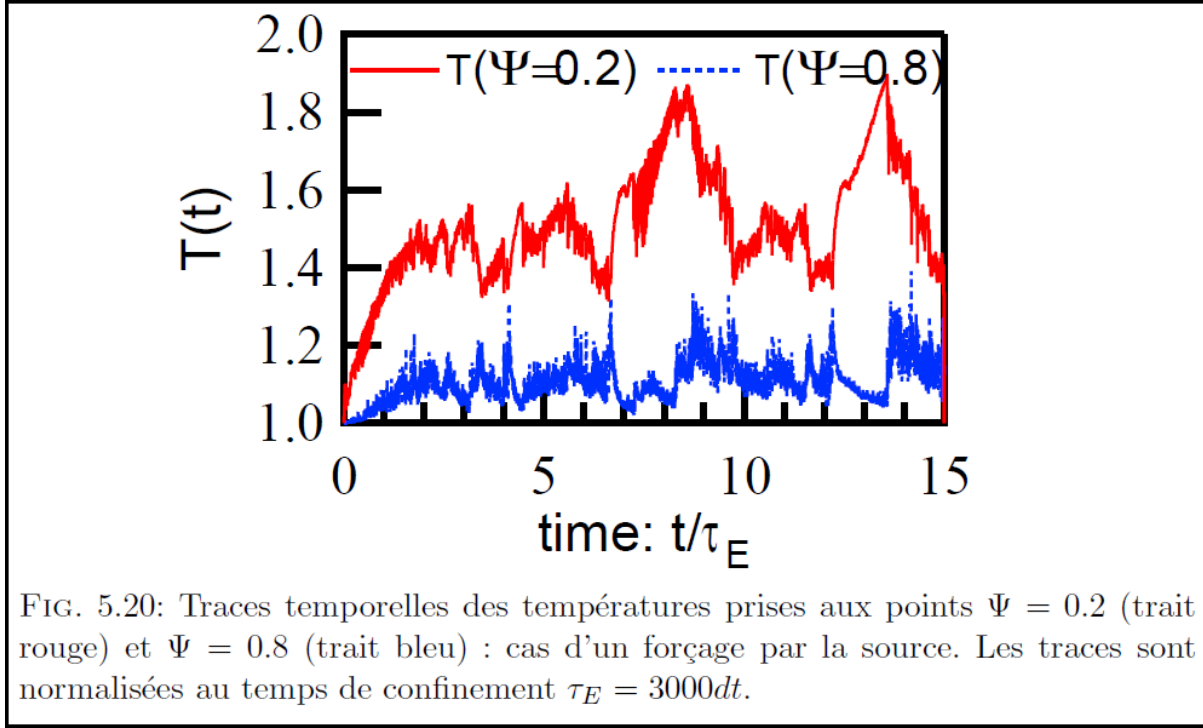


FIG. 5.20: Traces temporelles des températures prises aux points $\Psi = 0.2$ (trait rouge) et $\Psi = 0.8$ (trait bleu) : cas d'un forçage par la source. Les traces sont normalisées au temps de confinement $\tau_E = 3000dt$.

FIGURE 5.11 – Image issue du manuscrit de thèse de Guillaume Darnet.

L'utilisation des filtres sur la fonction de distribution augmentent significativement les seuils des gradients à atteindre pour déclencher des avalanches, lorsqu'ils ne les empêchent pas. Cela signifie qu'une avalanche est amorcée par des échelles spatiales de l'ordre du pas de discrétisation, échelles qu'une approche spectrale considère comme sujet au problème d'aliasing. Enfin, l'utilisation d'un pas de temps Δt variable pour l'intégration temporelle permet de diminuer l'erreur. Cela tend à repousser encore le seuil de déclenchement des avalanches.

En résumé, l'utilisation de plusieurs améliorations des méthodes numériques ainsi que le fait de respecter la contrainte $\bar{f} \geq 0$, tout en diminuant le pas d'espace en (α, ψ) d'un facteur (4×4) et en diminuant le pas de temps d'un facteur $\times 10^2$ à $\times 10^4$, repousse le seuil de déclenchement des avalanches. Seule la présence d'erreurs numériques permet d'expliquer l'existence de ces événements.

5.1.7 Pistes de détermination de la valeur de λ

La nature des simulations du code TERESA dépend donc d'une façon très importante du paramètre λ introduit pour décrire la réponse des électrons adiabatiques. L'argument "premier principe" du modèle rebond est fortement dégradé car la détermination théorique de ce paramètre est difficile. Pour pallier ce problème, j'ai ajouté la prise en compte de N espèces dans le code TERESA en suivant un modèle développé dans [Drouot 2014b]. Les électrons piégés sont alors décrits par une fonction de distribution. La réponse adiabatique est restreinte à la description des particules passantes ce qui diminue d'autant

le poids de λ en fonction du ratio particules passantes - particules piégées. Ignorer l'impact des passantes supprime totalement λ . Des études menées récemment [Drouot 2015] vont dans le sens d'un régime flux zonaux pour des simulations ions-électrons piégés cinétiques. L'ajout d'électrons cinétiques permet aussi à la densité d'évoluer au cours du temps alors que dans l'approche adiabatique la densité des électrons est une fonction du potentiel électrique et aucun transport de la densité électronique n'est possible car $[\Phi, f(\Phi)] = \partial_\psi \Phi f'(\Phi) \partial_\alpha \Phi - \partial_\alpha \Phi f'(\Phi) \partial_\psi \Phi = 0$ pour toute fonction f . Les propriétés de transport de ce système plus complet, même s'il est sujet à des flux zonaux, semble montrer un transport de chaleur plus efficace.

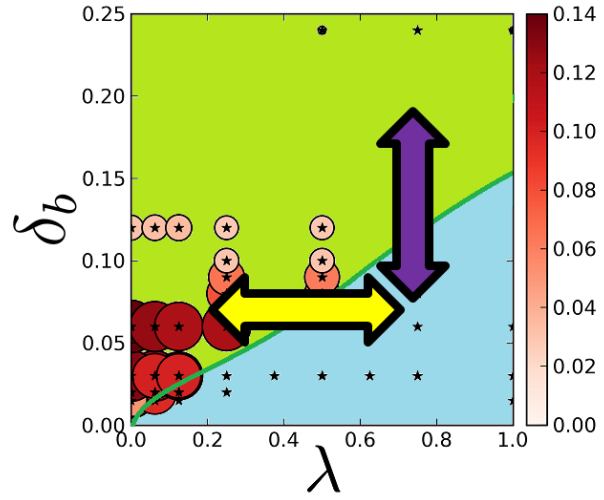
5.2 Processus de saturation : apparition d'avalanches

Je me suis intéressé aux conditions de déclenchement de relaxations dans les simulations de TERESA. La présence d'une transition flux zonaux - streamers, voire d'avalanche, semblant possible dans un tel système, quels mécanismes sont nécessaires à leur apparition? Deux moyens sont explorés dans la partie suivante : l'ajout d'un profil de température dans l'équation de quasi - neutralité eq.(4.13) et l'ajout d'un puits dans l'équation de Vlasov. La valeur des grandeurs caractéristiques est $\rho_c = 0.06$ et $\delta_b = 0.1$ comme pour les études réalisées dans [Sarazin 2005].

5.2.1 Transitions flux zonaux - streamers : étude du plan (δ_b, λ)

Le confinement quasi parfait du régime flux zonaux conduit à l'apparition de gradients de température extrêmement importants sans faire relaxer le système, en particulier lorsqu'il est forcé par le flux. Il semble alors raisonnable d'attribuer à l'augmentation de la température le rôle d'élément déclencheur des relaxations. C'est la valeur de la température qui est donc utilisée pour se déplacer dans le plan (δ_b, λ) dans le but de changer la nature du transport. Plusieurs chemins peuvent être empruntés, deux parcours sont matérialisés par les flèches jaune et violette sur la figure 5.12 qui reprend le tracé de la figure 5.8a. La flèche jaune correspond au choix d'impacter la valeur de λ lorsque la température évolue. La valeur de $A = C_e(1 - \lambda)$ (eq.(5.7)) varie dans l'intervalle $[0, C_e]$. Ce choix n'a pas été retenu car l'établissement d'une valeur numérique de λ étant difficile, introduire une dépendance en température a semblé artificiel. La flèche violette correspond au choix d'impacter la valeur de δ_b . L'utilisation du rayon de Larmor et de la largeur banane dans l'équation de quasi-neutralité est introduite par la simplification de l'opérateur consistant à appliquer deux fois la moyenne sur des temps de rebond. Tel qu'implémenté initialement dans TERESA, ce terme dépend donc de ρ_c et δ_b pris pour $T = T_0 = 1$, une valeur standard de température. Cependant le rayon de Larmor comme la largeur banane augmentent lorsque l'énergie cinétique des particules augmente : $\rho_{c,s} = \frac{\sqrt{2m_s T}}{Z_s B}$ et $\delta_{b,s} = \rho_{c,s} q_0 / \sqrt{\epsilon}$. C'est cette seconde option qui a été choisie avec la prise en compte de la température sous forme d'un profil qui varie au cours du temps, à la place d'une simple constante de l'espace et du temps.

FIGURE 5.12 – Illustration de deux transitions possibles entre le régime flux-zonaux et le régime streamers. La flèche jaune impacte la valeur de λ , la nature de la réponse adiabatique. La flèche violette impacte un paramètre interne du système, la valeur de la largeur banane δ_b .



5.2.2 Forçage par les bains : transition totale

Un ensemble de simulations utilisant différentes intensités de forçage par les bains thermiques a été réalisé pour la valeur de λ la plus contraignante en terme de flux zonaux, $\lambda = 1$. La modification apportée permet de trouver un seuil de forçage qui assure au système de se retrouver en régime streamers. Avant d'atteindre ce régime pleinement streamers, les vortex présents dans le régime flux zonaux prennent une forme triangulaire dont la pointe pénètre sur une distance de plus en plus grande à mesure que la température augmente. Sans la prise en compte de la variation temporelle et spatiale de la température dans l'équation de quasi-neutralité, la largeur banane qui définit la frontière entre les deux régimes est de $\delta_b \simeq 0,1525$. La température nécessaire retrouvée pour qu'une largeur banane de taille $\delta_b = 0.1$ à $T = 1$ dépasse ce seuil est $T \simeq 2.33$. Cette mesure est cohérente avec la simple formule $\sqrt{T} = 2.33 \times (\delta_b = 0.1) \simeq \sqrt{T} = 1.0 \times (\delta_b = 0,1525)$. Ce seuil de température doit être atteint sur l'ensemble de la boîte pour faire basculer le système d'un régime flux zonaux à un régime streamers.

5.2.3 Forçage par le flux : régime intermédiaire

Le forçage par le flux est utilisé en redémarrant des simulations initialement forcées par les bains thermiques et bloquées en régime flux zonaux (flux quasi nul). Dans une première phase, l'utilisation d'une source, en l'absence de transport, augmente localement la température du plasma en gardant un flux qui reste quasi nul, équivalent à celui obtenu en forçage par les bains thermiques. La température augmente alors jusqu'à déclencher de micros relaxations périodiques sous forme de libération de plumes : le flux moyen augmente d'un facteur $\times 10$ et correspond au flux injecté dans le système par la source. Pendant la relaxation, le flux augmente d'un facteur $\times 100$ sur des temps $\tau \simeq 1 \omega_0^{-1}$, le tout sans augmentation significative de l'erreur numérique. Ce flux maximal reste cependant inférieur d'un facteur $\times 10$ au régime streamers. En effet, la topologie du potentiel électrique reste essentiellement de type flux zonaux mais le transport moyenné au cours du temps ne s'annule en aucun point du rayon, la système n'est plus un isolant.

5.2.4 Utilisation d'un terme de pertes parallèles

Différentes études du modèle TOKAM2D ont montré que le terme de pertes parallèles sur la vorticit  influence grandement l'auto organisation du syst me. Ce puits emp che les structures du syst me de cro tre jusqu'  la taille de la bo te. Un nombre plus important de modes d'amplitude comparable est alors disponible pour participer   la dynamique non lin aire et faire appara tre un transport balistique. En accord avec l'objectif d'introduire un r gime de relaxations ou d'avalanches dans le mod le TERESA, l'ajout d'un terme de perte parall le a  t  entrepris. Pour guider le choix de ce nouvel op rateur, une comparaison avec le mod le fluide de TOKAM2D est effectu e : un mod le fluide de TERESA est d riv  pour cela. L'hypoth se selon laquelle les effets de rayon de Larmor fini sont n gligeables, sauf pour le terme de polarisation dans la quasi-neutralit  ($\mathcal{J}(x) = x$), est faite pour faciliter les calculs. Il s'ensuit trois d finitions :

- soit $W = \Delta\phi$ la vorticit  dans le mod le de TOKAM2D, nous d finissons $W = C_e(\phi - \lambda < \phi >_\alpha) - C_i\bar{\Delta}\phi = \frac{1}{n_0} \int f j_E(E) dE - 1$ la vorticit  dans le mod le de TERESA, avec n_0 une densit  de normalisation.
- l' galit  $\int f j_E(E) dE = (W + 1)n_0$ permet de d finir l' quation de vorticit  par int gration de l' quation de Vlasov.
- l' nergie thermique dans le mod le TERESA est approxim e par $T = \frac{1}{n_0} \int f j_E(E) dE$. Le transport de chaleur dans TERESA est   comparer au transport de densit  dans TOKAM2D. Cette seconde  quation est aussi obtenue en int grant l' quation de Vlasov en  nergie, mais apr s l'avoir multipli e par E pour acc der au second moment fluide.

L'int gration en  nergie de l' quation de Vlasov eq.(4.6) de TERESA (sans second membre) permet donc de retrouver le syst me suivant :

$$\partial_t T - [\phi, T] + \omega_d \partial_\alpha \int f E^2 j_E(E) dE = 0 \quad (5.8)$$

$$\partial_t W - [\phi, W] + \omega_d \partial_\alpha T = 0 \quad (5.9)$$

En faisant l'hypoth se de fermeture fluide qui n glige l'impact du terme d'ordre sup rieur $\omega_d \partial_\alpha \int f j_E(E) E^2 dE$, l'analogie avec le syst me de TOKAM2D est forte. L'utilisation d'une source dans TERESA permet de retrouver le for age par le flux du mod le de TOKAM2D. Le terme de pertes parall les de TOKAM2D $-\sigma N e^{\Lambda-\phi}$ qui agit sur la densit  contribue aussi au for age : cette contribution correspond au bord froid de la bo te de simulation de TERESA. Les deux termes de dissipation $D\Delta N$ et $\nu\Delta W$ de TOKAM2D manquent au mod le fluide d riv  de TERESA (le premier terme deviendrait $D\Delta T$), mais les effets de rayon de Larmor et de largeur banane finis ainsi que la dissipation num rique limitent implicitement la taille des plus petites structures dans le syst me. Enfin, le terme r ellement manquant est le terme de perte parall le pour la vorticit , $\sigma(1 - e^{\Lambda-\phi})$ dans TOKAM2D.

Une lin arisation de ce terme de perte parall le est ajout  au mod le complet de TERESA pour agir uniquement sur la vorticit  (et non la temp rature) en utilisant les

mêmes décompositions polynomiales que pour le forçage par les sources. Il est décrit section 4.2.1.2 et rappelé ici dans le cadre de la réduction :

$$\partial_t f = -\sigma \Phi \left(1 - \frac{2}{5} E/T_0\right) e^{-E/T_0} \quad (5.10)$$

$$\Rightarrow \partial_t W = -\sigma \Phi \quad \& \quad \partial_t T = 0 \quad (5.11)$$

En régime streamers, l'utilisation d'un tel terme de perte modifie le spectre du système et diminue l'efficacité du transport car les modes les plus impactés par la réorganisation sont les modes qui transportent le plus efficacement, les cellules streamers (courbe bleue figure 5.13). En régime flux zonaux le mécanisme permet à l'inverse de diminuer l'impact des barrières de potentiel : de faibles valeurs de σ suffisent pour autoriser le système à relaxer sous forme de détachement de plumes, voir figure Fig 5.14. L'efficacité du transport augmente lorsque l'effet du puits augmente jusqu'à atteindre le niveau du transport du régime streamers qui lui diminue lorsque σ augmente (courbe rouge figure 5.13). Ce point de rencontre est le maximum d'efficacité pour $\lambda = 1$. Augmenter σ au-delà de ce point diminue le transport.

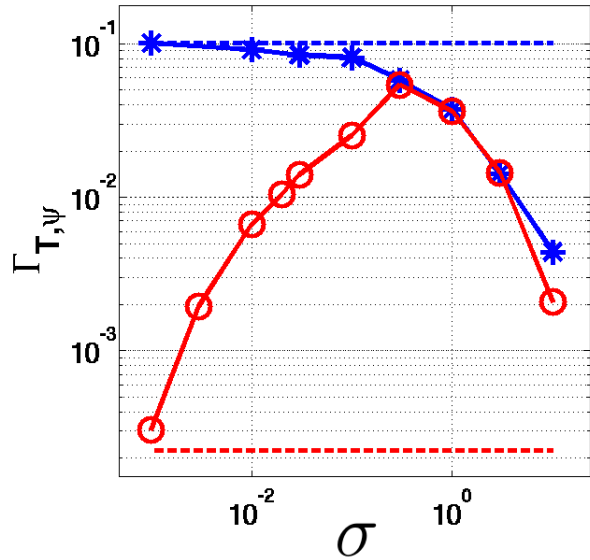
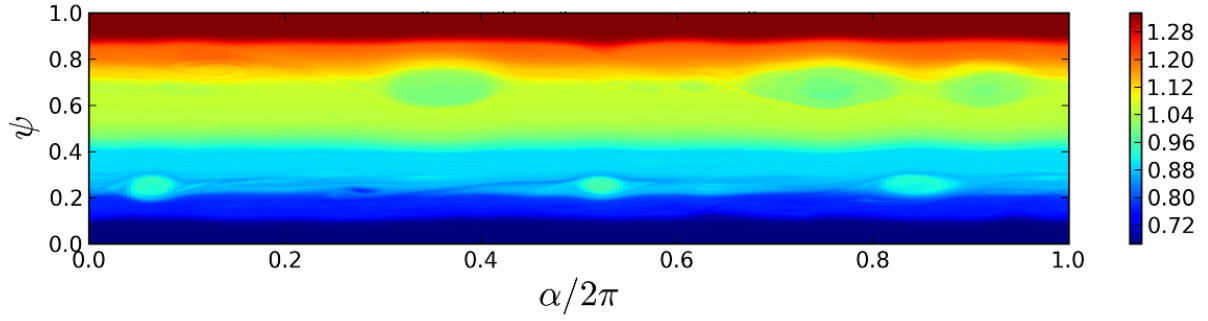


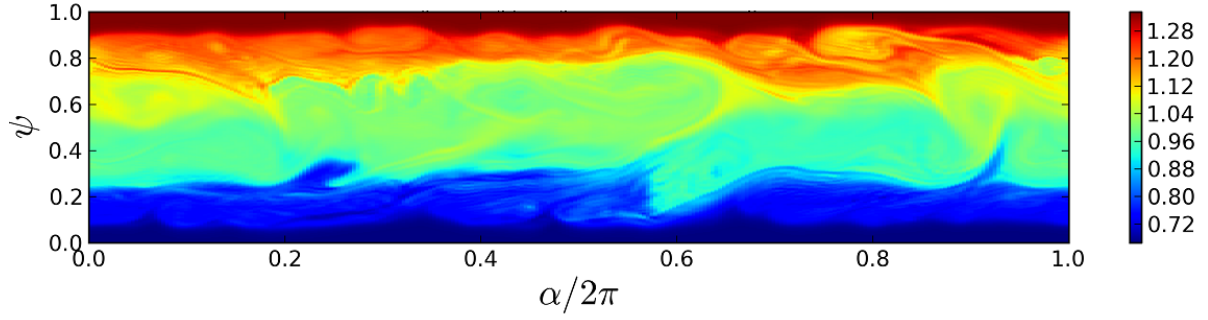
FIGURE 5.13 – Illustration de l'intensité du transport turbulent pour deux séries de simulations effectuées en variant l'intensité du puits : régime flux zonaux $\lambda = 1$ (courbe rouge) et régime streamers $\lambda = 0$ (courbe bleue). Les courbes en trait discontinu sont les valeurs du transport sans le terme puits. Le transport résiduel du régime flux zonaux est une borne supérieure.

L'ajout de ces pertes parallèles change complètement la nature du transport même si la contribution instantanée du terme reste très faible. Cette petite contribution a pour conséquence première la modification du spectre de la fonction de distribution. C'est dans un deuxième temps la réponse des autres opérateurs de l'équation de Vlasov à ce changement de spectre qui change radicalement le transport. Améliorer la gyro-moyenne, améliorer la résolution numérique (en apportant des optimisations au code pour maîtriser les coûts de calculs et diminuer les erreurs) ou chercher de nouvelles formes de sources n'a pas permis une telle richesse. Cet ajout aurait dû intervenir plus tôt dans le développement de TERESA car il permet, pour un faible coût de développement, de retrouver une physique plus en accord avec nos attentes influencées par les autres modèles de turbulence. De plus, ce troisième régime d'auto organisation affaiblit les contraintes issues des forts gradients qui prennent en défaut la méthode numérique. L'exploration

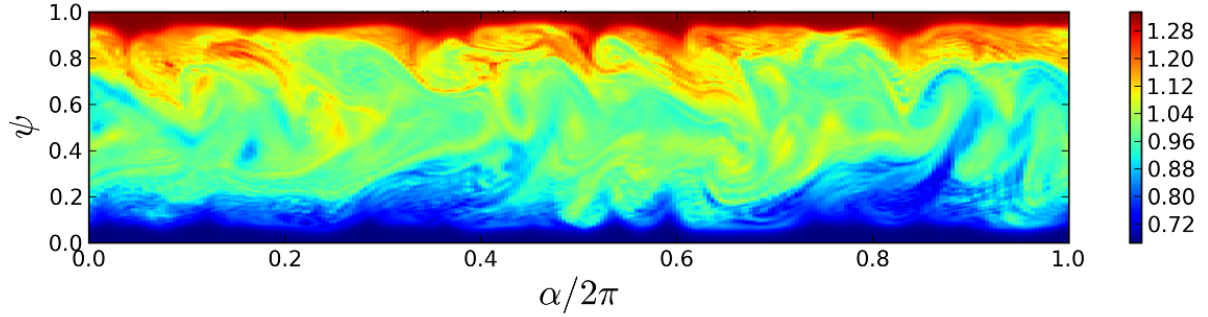
analytique du modèle de TERESA doit maintenant affiner l'expression de ce nouveau terme pour qu'il soit tout à fait légitime et non simplement inspiré de TOKAM2D.



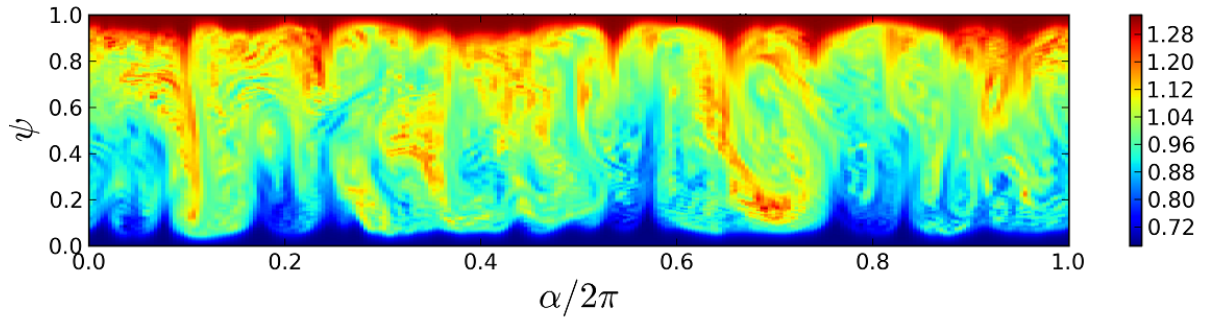
(a) Champ de température pour $\lambda = 0$ et $\sigma = 0$: aucun transport.



(b) Champ de température pour $\lambda = 0$ et $\sigma = 0.003$: apparition de phénomènes de transport.



(c) Champ de température pour $\lambda = 0$ et $\sigma = 0.03$.



(d) Champ de température pour $\lambda = 0$ et $\sigma = 0.3$: transport sous forme de plumes.

FIGURE 5.14 – Illustrations de la température dans le plan (α, ψ) pour des simulations qui seraient en régime flux zonal ($\lambda = 0$) sans le terme de pertes parallèles $-\sigma\Phi(1 - \frac{2E}{5T_0})e^{-\frac{E}{T_0}}$.

5.3 Réduction fluide de simulations cinétiques

L'approche fluide ayant guidé dans la section précédente l'introduction d'un terme de pertes parallèles dans un modèle cinétique, il est légitime de vouloir effectuer l'exercice inverse en profitant d'un modèle cinétique, peut-être plus complet, pour guider le développement d'un modèle fluide avec pour objectif, par exemple, de déterminer une fermeture «optimale» pour un critère quelconque. Pour cela, la détection d'une fermeture fluide est entreprise dans des simulations cinétiques de TERESA à l'aide de réductions effectuées par la méthode PoPe. Cette démarche peut théoriquement mettre en évidence sous forme d'un résidu la partie de la dynamique qui serait purement cinétique car non captée par une réduction fluide. On s'intéresse donc à la dynamique temporelle $\partial_t \bar{f}$ pour construire cette fermeture. D'autres approches pour construire des fermetures existent, par exemple en cherchant à diminuer les écarts non pas entre les dérivées temporelles des approches fluide et cinétique mais en se concentrant sur les relations de dispersion [Sarazin 2009].

5.3.1 Dérivation d'une version fluide du modèle de TERESA

La hiérarchie des équations fluides est obtenue par le calcul des moments de la fonction de distribution, soit $\bar{M}_n = \int \bar{f} E^n j_\kappa(\kappa) d\kappa j_E(E) dE$ le moment d'ordre n de la fonction de distribution. L'intégration de l'équation de Vlasov conduit alors à :

$$\partial_t \bar{f} - [\bar{\Phi}, \bar{f}] + \omega_d E \partial_\alpha \bar{f} = 0 \quad (5.12)$$

$$\partial_t \bar{M}^n - \int [\bar{\Phi}, \bar{f}] E^n j_\kappa(\kappa) d\kappa j_E(E) dE + \omega_d \partial_\alpha \bar{M}^{n+1} = 0 \quad (5.13)$$

$$\partial_t \bar{M}^n - [\Phi, \bar{M}^n] - \int [\bar{\Phi} - \Phi, \bar{f}] E^n j_\kappa(\kappa) d\kappa j_E(E) dE + \omega_d \partial_\alpha \bar{M}^{n+1} = 0 \quad (5.14)$$

Pour aller plus loin dans ce calcul, il est nécessaire d'approximer l'opérateur de moyenne rebond. Étant donné que les différents traitements numériques de ce terme n'ont pas conduit à des changements significatifs de la dynamique, un simple développement de Taylor est utilisé : $\mathcal{J}_{0,\rho_c,\delta_b} \bar{f} \simeq (1 + \frac{E\delta_b^2}{4} \partial_\psi^2 + \frac{E\rho_c^2}{4} \partial_\alpha^2) \bar{f}$. L'équation de Vlasov est alors approximée en utilisant le nouvel opérateur de moyenne avant d'intégrer l'espace des vitesses :

$$\partial_t \bar{f} - [\Phi, \bar{f}] - \frac{\delta_b^2}{4} [\partial_\psi^2 \Phi, \bar{f} E] - \frac{\rho_c^2}{4} [\partial_\alpha^2 \Phi, \bar{f} E] + \omega_d \partial_\alpha \bar{f} E \simeq 0 \quad (5.15)$$

$$\partial_t \bar{M}^n - [\Phi, \bar{M}^n] - \frac{\delta_b^2}{4} [\partial_\psi^2 \Phi, \bar{M}^{n+1}] - \frac{\rho_c^2}{4} [\partial_\alpha^2 \Phi, \bar{M}^{n+1}] + \omega_d \partial_\alpha \bar{M}^{n+1} \simeq 0 \quad (5.16)$$

La difficulté de l'approche fluide réside dans la hiérarchie infinie d'équations couplées au moment d'ordre supérieur, ici les termes \bar{M}^{n+1} . Une hypothèse de fermeture doit être effectuée pour que le système ait autant d'inconnues que d'équations, pour ne plus constamment faire appel au moment $n+1$ pour calculer la dynamique du moment n .

5.3.2 Contribution des termes de l'équation de Vlasov

L'étude de la contribution de chacun des termes de l'équation de Vlasov eq.(5.13,5.14) pour différents moments fluides permet d'estimer la contribution que chaque terme impose au système, en particulier le terme qui fait appel au moment d'ordre supérieur, celui qui portera la modification principale pour obtenir une fermeture fluide. Cette étape permet aussi d'estimer l'erreur numérique commise sur l'évolution des moments fluides en comparant les dérivées temporelles mesurées à partir des sorties de TERESA $\partial_t \tilde{M}^n$ et la contribution théorique de chacun des termes de l'équation de Vlasov. Si les égalités ne sont pas parfaites, les écarts sont attribués à des erreurs numériques qui seront une limite pour la détection d'équations fluides dans une simulation cinétique.

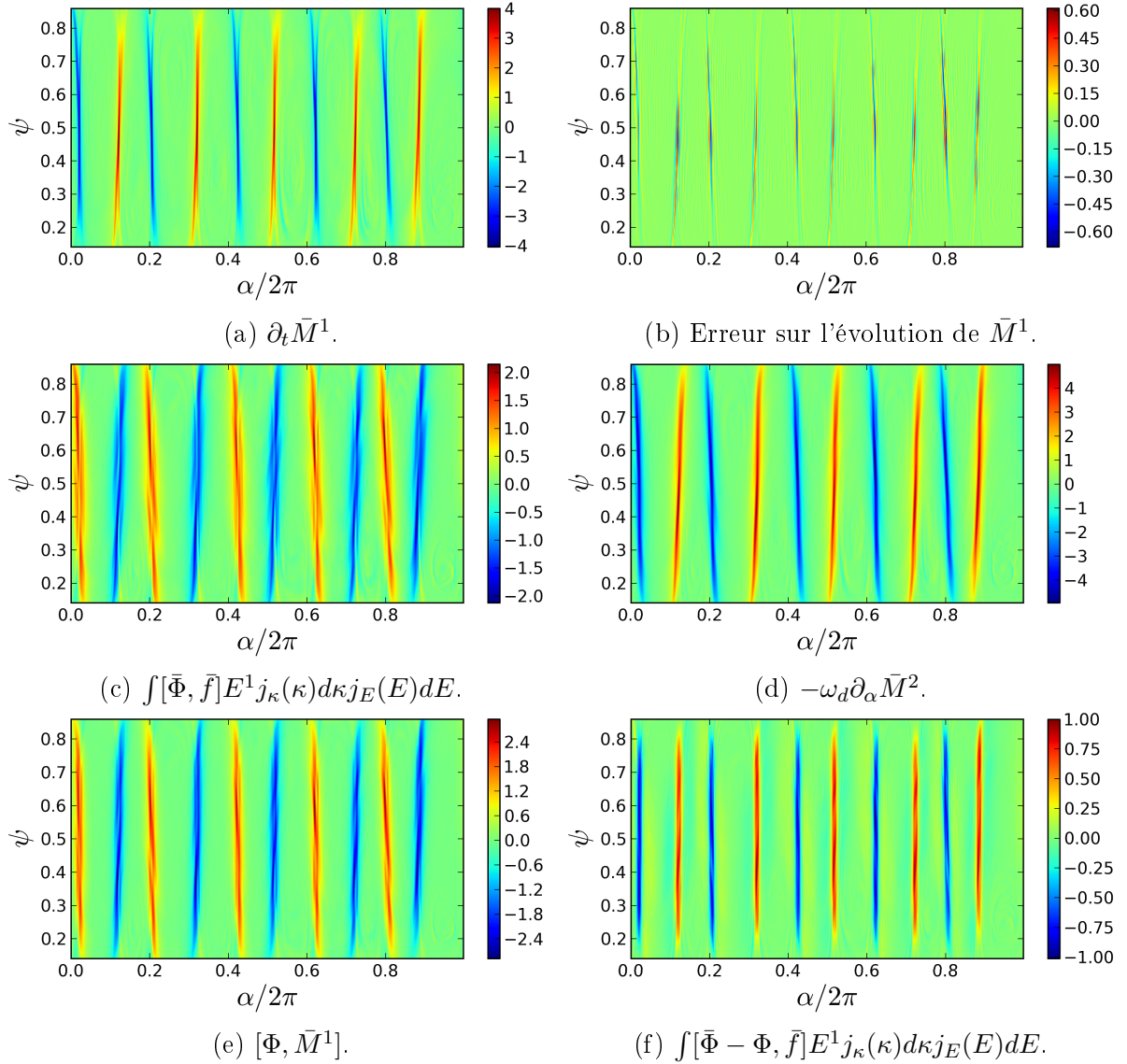


FIGURE 5.15 – Illustrations des différents termes qui composent les équations eq.(5.13) et eq.(5.14) pour le moment $n = 1$ en régime streamers. La coloration des images est propre à chaque terme pour discerner les détails.

En régime flux zonaux, pour les trois premiers moments, la contribution du crochet de Poisson est comparable à celle de l'advection : les intensités et les motifs sont similaires. La décomposition du crochet telle que dans l'équation eq.(5.14) montre que la contribution fluide $[\Phi, \bar{M}^n]$ et la contribution cinétique $\int [\bar{\Phi} - \Phi, \bar{f}] E^n j_\kappa(\kappa) d\kappa j_E(E) dE$ s'opposent : la contribution fluide est cependant trois fois supérieure à la contribution cinétique qui ne fait donc qu'affaiblir la première. Bien que la conservation totale des moments de la fonction de distribution soit de l'ordre de $10^{-5} \omega_0^{-1}$, les bilans locaux des trois premiers moments montrent des erreurs locales qui atteignent 8% à 10% par endroit. Les erreurs sont concentrées dans des structures de petites tailles à la jonction entre deux vortex.

En régime streamers l'organisation est différente. L'advection linéaire devient plus forte que le crochet de Poisson d'un facteur deux car les streamers imposent de fortes variations au système dans la direction α . Le point particulier de ce régime est l'impact des composantes fluide et cinétique du crochet de Poisson : pour le moment 0, les deux composantes impriment des motifs allant tous les deux dans la même direction que l'advection linéaire et donc la dérivée temporelle totale, alors que pour les moments d'ordre supérieur, la partie fluide du crochet s'oppose à la dynamique générale. Cette inversion de dynamique vient de fait qu'aucun gradient moyen dans la direction radiale n'est présent dans la densité (le premier moment) alors que les moments d'ordre supérieur sont impactés par le gradient de température. L'erreur sur la conservation totale des moments est toujours de l'ordre de $10^{-5} \omega_0^{-1}$ alors que l'erreur sur les bilans locaux peut atteindre 10% à 15% par endroit. L'erreur se concentre sur les fronts parallèles à la direction radiale qui sont générés par les streamers (voir Fig. 5.15).

De façon générale, les dérivées temporelles des moments élevés ont des motifs plus diffus dans l'espace que les moments d'ordre faible. La dynamique des moments élevés tend à diminuer, jusqu'à ce que les moments deviennent complètement insensibles au potentiel électrique et au mouvement de précession. Utiliser une «infinité» de moments fluides ne semble pas nécessaire pour le modèle de TERESA. A l'inverse, pour capturer les différentes contributions les plus marquées, l'utilisation de trois moments semble nécessaire. La présence d'un gradient de température inversant la contribution du crochet en régime streamers pour le moment d'ordre 1 (le second moment) doit être captée car elle est une signature du régime streamers. Pour que l'équation du moment d'ordre 1 soit la plus réaliste possible, une bonne approximation de la précession impactant ce moment est jugée nécessaire : le moment d'ordre 2 (le troisième moment) semble donc nécessaire lui aussi. Le choix d'une troncature au niveau du troisième moment est fait. L'étude de simulations TERESA montrant une organisation relativement similaire pour les moments $n \geq 2$, l'hypothèse de fermeture effectuée est $\bar{M}^3 \simeq \bar{M}^2$.

5.3.3 Détection d'équations fluides dans TERESA avec PoPe

L'analyse effectuée section 5.3.2 a conduit à retenir la fermeture fluide suivante :

$$\partial_t \bar{M}^0 = a_0[\Phi, \bar{M}^0] + b_0[\partial_\alpha^2 \Phi, \bar{M}^1] + c_0[\partial_\psi^2 \Phi, \bar{M}^1] + d_0 \partial_\alpha \bar{M}^1 + \varepsilon_0 \quad (5.17)$$

$$\partial_t \bar{M}^1 = a_1[\Phi, \bar{M}^1] + b_1[\partial_\alpha^2 \Phi, \bar{M}^2] + c_1[\partial_\psi^2 \Phi, \bar{M}^2] + d_1 \partial_\alpha \bar{M}^2 + \varepsilon_1 \quad (5.18)$$

$$\partial_t \bar{M}^2 = a_2[\Phi, \bar{M}^2] + b_2[\partial_\alpha^2 \Phi, \bar{M}^2] + c_2[\partial_\psi^2 \Phi, \bar{M}^2] + d_2 \partial_\alpha \bar{M}^2 + \varepsilon_2 \quad (5.19)$$

Les termes ε_n rassemblent la dynamique que les autres termes de l'équation ne peuvent pas capter. Ces termes sont donc des signatures de l'erreur numérique ainsi que des signatures des contributions purement cinétiques non captées par le modèle fluide. Les dérivées temporelles et les erreurs pour chacune de ces équations sont représentées pour une simulation streamers (régime plus exigeant que le régime flux zonaux) sur la figure 5.16. Ces images sont cadrées pour ne pas prendre en compte les zones tampons sur les bords en ψ car l'objectif est de trouver une fermeture non collisionnelle.

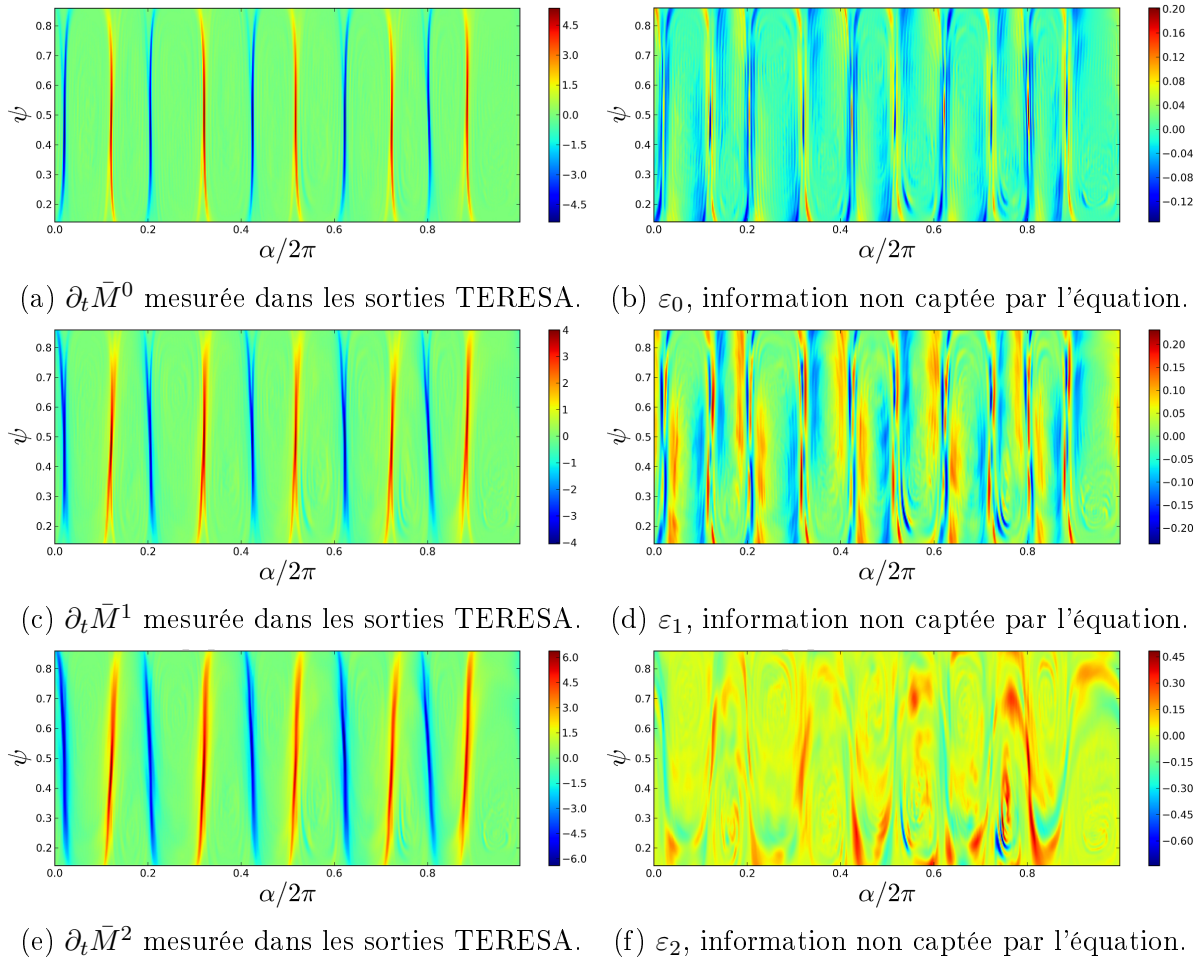


FIGURE 5.16 – Représentation de la dérivée temporelle des trois premiers moment (colonne de gauche) et des trois résidus associés (colonne de droite) présents dans la proposition de fermeture fluide des équations eq.(5.17, 5.18 5.19).

Les maxima et minima de l'erreur correspondent à environ 5% des maxima et minima de la dérivée temporelle pour les deux premiers moments. Cette erreur n'est pas directement comparable aux erreurs sur les bilans (Fig. 5.15b) car, bien que structurée, elle n'a pas le même motif que la dérivée temporelle, elle contribue plutôt sous forme d'une dissipation en régularisant les fronts. L'erreur du troisième moment est un facteur deux plus importante que celle des deux premiers. Sa structure est aussi plus étalée. Dans les trois cas, l'erreur possède une empreinte «moins orthogonale» à la dérivée temporelle que le terme de pertes parallèles $-\sigma\Phi P(E)e^{-E}$: qualitativement, les effets cinétiques semblent ici moins riches que la contribution de pertes parallèles ; quantitativement, ces effets cinétiques permettent cependant une description plus précise du modèle rebond. L'étude du poids de chaque terme des équations eq.(5.13) et eq.(5.14) dans les deux régimes est résumée dans le tableau tab. 5.3.

	$\mathbb{E}(a) : \sigma(a)$	$\mathbb{E}(b) : \sigma(b)$	$\mathbb{E}(c) : \sigma(c)$	$\mathbb{E}(d) : \sigma(d)$
ST : $n = 0$	$0.88 : 0.002$	$0,31 \times 10^{-3} : 4 \times 10^{-6}$	$1,7 \times 10^{-3} : 40 \times 10^{-6}$	$1.02 : 0.0007$
ST : $n = 1$	$0.62 : 0.008$	$0,19 \times 10^{-3} : 2 \times 10^{-6}$	$0,79 \times 10^{-3} : 20 \times 10^{-6}$	$0.87 : 0.005$
ST : $n = 2$	$0.02 : 0.008$	$0,003 \times 10^{-6} : 6 \times 10^{-6}$	$82 \times 10^{-6} : 10 \times 10^{-3}$	$1.18 : 0.017$
ZF : $n = 0$	$0.97 : 0.002$	$0,30 \times 10^{-3} : 50 \times 10^{-6}$	$1,2 \times 10^{-3} : 30 \times 10^{-6}$	$1.00 : 0.009$
ZF : $n = 1$	$0.90 : 0.006$	$0,21 \times 10^{-3} : 40 \times 10^{-6}$	$0,88 \times 10^{-3} : 20 \times 10^{-6}$	$1.00 : 0.010$
ZF : $n = 2$	$0.75 : 0.020$	$0,46 \times 10^{-3} : 130 \times 10^{-6}$	$1,7 \times 10^{-3} : 120 \times 10^{-6}$	$2.94 : 0.040$

TABLE 5.3 – Caractérisation des poids des équations eq.(5.17,5.18,5.19) dans le régime streamers (ST) et le régime flux zonaux (ZF). Espérance \mathbb{E} et écart-type σ des poids au cours du temps.

A l'exception de l'équation du moment $n = 2$ dans le cas streamers, les différents poids sont du bon ordre de grandeur. L'écart type des différents poids des deux premiers moments est relativement faible ce qui signifie que les valeurs moyennes sont quasiment constantes au cours du temps, l'équation retrouvée ne varie donc pas significativement au cours du temps. La contribution du moment d'ordre $n + 1$ dans les crochets de poisson, approximée par les termes associés aux poids b et c , respecte un facteur ~ 3 tel que $c/b \simeq \delta_b^2/\rho_c^2$, le rapport des longueurs bananes et rayon de Larmor au carré.

En ce qui concerne les poids de l'équation du moment $n = 2$, le premier point est l'écart, pour chacun des régimes, entre les poids du moment $n = 2$ et les moments $n = 0$ et $n = 1$. Dans les deux régimes, la dynamique de ce moment semble essentiellement correspondre à une dynamique de précession. Ce point a conduit à ne pas directement négliger $\partial_\alpha \bar{M}^3$ mais à remplacer ce terme par $\partial_\alpha \bar{M}^2$ pour approximer cette contribution qui se trouve être dominante. Le second point est l'écart des poids entre les deux régimes, au-delà de la forte empreinte de la précession. Cette différence ne remet pas en cause la détermination d'une fermeture unique pour ces deux auto-organisations. La méthode PoPe a pour objectif d'extraire le maximum d'information de la dérivée temporelle qu'elle utilise en

entrée. Dans le cas présent, les simulations du code TERESA sont entachées d'une erreur importante, erreur qui change de nature lorsque la physique change de nature. A mon avis, l'écart retrouvé dans les équations détectées pour les deux régimes tient essentiellement à la modification de l'empreinte de l'erreur. Pour trancher cette question, il est nécessaire de mettre en place une procédure de filtre qui permettra de ne plus mettre en défaut les méthodes numériques de TERESA pendant les simulations. Pour le moment, ces erreurs sont attribuées à l'utilisation d'une méthode semi-Lagrangienne sur un système contenant de forts gradients. Malheureusement, avant d'effectuer les premières simulations et de mesurer l'erreur avec PoPe, je ne savais pas que l'erreur serait si forte et éblouirait autant la méthode PoPe. Des schémas capables de reproduire des chocs auraient dû être choisis, sauf si le régime choisi pour utiliser le modèle devient le régime intermittent retrouvé avec le terme de pertes parallèles.

Une stratégie pour contourner le problème d'erreur numérique de TERESA en ce qui concerne la réduction fluide est d'utiliser les simulations uniquement pour déterminer une approximation des états non linéaires caractéristiques. La fonction de distribution de ces états serait ensuite utilisée pour calculer, hors ligne, une dérivée temporelle théorique plus précise grâce à une méthode numérique mieux adaptée. Cette nouvelle dérivée temporelle serait alors utilisée comme entrée pour la réduction effectuée avec PoPe. Uniquement l'intégration temporelle serait confiée à TERESA, l'étude de la dynamique instantanée passerait par l'utilisation d'une méthode plus précise pour déterminer la dérivée temporelle avant d'utiliser PoPe pour faire des réductions.

CHAPITRE 6

Conclusion

Dans le but de comprendre le transport turbulent des plasmas de fusion, j'ai utilisé un code fluide simulant le plasma de bord et j'ai développé un code cinétique simulant la turbulence des particules piégées. Pour avoir confiance dans ces outils numériques et leurs résultats, il est indispensable de les vérifier. Le travail dans cette direction, l'utilisation de méthodes telles que la Method of Manufactured Solutions (MMS), m'ont conduit à développer une méthode de vérification exhaustive des codes de calculs scientifiques. Basé sur un concept simple, cet outil s'est développé dans différentes directions me conduisant à revisiter les problèmes de la vérification et des réductions de modèles.

Dans cette conclusion, je résume la méthode PoPe et son champ d'application avant de présenter les résultats de mon travail d'analyse de la turbulence.

Vérification de codes avec PoPe

La méthode baptisée PoPe pour "Projection on Proper elements" est basée sur la recherche des équations qui ont servi à générer un ensemble de données. Si les équations retrouvées sont celles théoriquement implémentées dans le code, ce dernier est vérifié.

Le premier point fort de cette méthode est la simplicité de son concept : il part de l'utilisation d'outils élémentaires de régression pour les appliquer à l'univers idéal, car faiblement bruité, de la simulation numérique alors considérée comme une expérience. Aucune contrainte théorique n'est imposée sur la nature des équations, linéaire / non linéaire, ou le régime de la simulation, établi / transitoire voire régime chaotique, le tout en dimension quelconque. Dans la mesure où la simulation n'est pas influencée ou contrainte par cette méthode, PoPe peut directement être utilisée sur des simulations de production. Le travail analytique est relativement simple par rapport à celui qui peut être nécessité par d'autres vérifications. La mise en œuvre au niveau du code lui-même est peu exigeante, avec une adaptation immédiate à d'éventuels changements apportés aux équations à vérifier, contrairement aux Method of Manufactured Solutions. Le surcoût en temps de calcul est marginal (1%) quelque soit le code.

Dans son principe la méthode PoPe associe un poids à chaque élément d'une liste d'opérateurs dont la présence dans une équation est testée. Si la liste testée n'est pas suffisante pour retrouver l'équation, l'information qui n'a pas été capturée par les opérateurs considérés est récupérée dans un résidu. Si la liste contient des opérateurs qui ne sont pas utilisés dans l'équation étudiée, PoPe leur associera un poids nul. Pour un résidu d'amplitude faible, la concordance des poids mesurés avec leur valeur théorique permet d'établir la vérification. La précision atteinte pour mesurer ces poids est suffisante pour déterminer l'ordre effectif du schéma numérique.

L'étude des propriétés du résidu (amplitude, spectre de Fourier, etc.), donne accès à celles de l'erreur, c'est-à-dire de l'écart entre le modèle théorique et le code. Lors du travail de post-traitement, PoPe peut réaliser des tests de performance de méthodes numériques alternatives pour déterminer quelle approche est la plus adaptée à un problème donné.

Ces points forts font de la méthode PoPe un outil puissant pour le développement de codes en s'adaptant, voire en suggérant, les évolutions de celui-ci, qu'elles soient au niveau des équations du modèle analytique ou au niveau des méthodes numériques, le tout sans être contraint par la nature des régimes simulés.

Réduction de modèles avec PoPe

Cette réflexion sur le rôle d'un outil de simulation et la précision des équations qu'il implémente s'est étendue à une réflexion plus générale sur le rôle des équations. La compréhension profonde d'un phénomène se heurte en général à son interprétation et ensuite à sa définition. Cette compréhension fondamentale, lorsqu'elle est accessible, n'est pas nécessaire à une mise en équations qui permet de faire de la prédiction ou du contrôle. A l'inverse, pour comprendre le transport turbulent, j'ai essayé de capturer son comportement dans des modèles réduits manipulant des paradigmes plus simples.

Au delà de la vérification exhaustive dans des conditions réalistes, la méthode PoPe permet aussi de faire de la réduction systématique de modèles. En cherchant des équations simplifiées qui capturent une partie du signal dans un ensemble réaliste de données issues de simulations, PoPe permet de développer une approche quantitative de la réduction sous deux formes complémentaires. La première est l'étude de la barre d'erreur associée à la détermination des paramètres de contrôle du modèle réduit. La seconde est l'étude du résidu défini par l'information qui n'a pas été captée par le modèle réduit. Pour certains phénomènes, le filtre P_v est un outil puissant de réduction de modèle en permettant de dégrader la discrétisation d'une simulation sans modifier les équations effectivement utilisées et sans accumuler d'erreur numérique. En séparant l'information correctement simulée de celle qui ne l'est plus en raison de la restriction introduite au niveau de la discrétisation, on découvre des dynamiques à faible nombre de degrés de liberté du système.

Les réductions effectuées à partir de données issues du code de turbulence fluide TOKAM2D ont montré que la méthode PoPe peut, de façon précise, rapide et à moindre coût, estimer les paramètres d'un modèle proie prédateur qui caractérise bien la dynamique du transport. Elle a aussi permis de retrouver une incompatibilité de paradigme entre le transport turbulent et le modèle de transport basé sur une diffusion et une vitesse de pincement.

Les réductions effectuées sur le code cinétique TERESA sont moins abouties car bien que vérifié dans le sens conventionnel, la méthode PoPe a mis à jour des erreurs numériques dans le code lorsque l'auto-organisation du système pousse à l'établissement de forts gradients. Un essai de comparaison plus systématique entre l'approche fluide et la description cinétique a été réalisé.

Qualification de modèles avec PoPe

Une illustration de qualification de modèle a été réalisée. Il s'agit ici de rechercher les équations qui capturent l'information générée par un ensemble de mesures. Dans le cadre de la thèse, les mesures étaient des sorties de code bruitées. Cette approche semble prometteuse pour les expériences dont les mesures sont abondantes et/ou d'erreur faible. Dans le cas où la recherche d'un modèle exhaustif est un objectif trop ambitieux, la détermination des poids associés à des termes importants comme la viscosité est une alternative.

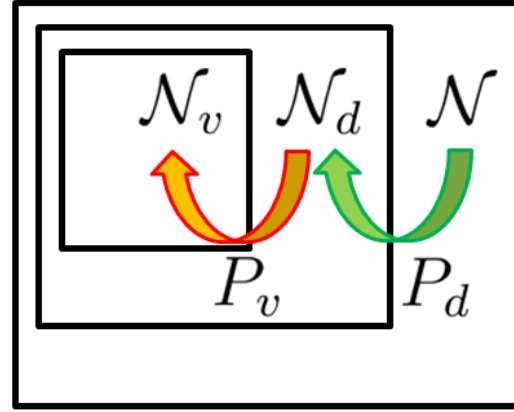
Interprétation de la procédure de discrétisation

Parmi les points qui sont apparus comme critiques lors du développement de PoPe se trouvent deux projections P_d et P_v qui symbolisent, de façon précise et pédagogique, le processus de discrétisation pour la première et les contraintes de cette discrétisation sur la dynamique du système pour la seconde. Ces projections restreignent ainsi l'ensemble des solutions continues \mathcal{N} à l'ensemble des solutions discrétisées $\mathcal{N}_d = P_d(\mathcal{N})$, lui même restreint à l'ensemble des solutions $\mathcal{N}_v = P_v(\mathcal{N}_d)$ dont la dynamique est correctement traitée par les méthodes numériques associées à la discrétisation retenue et l'équation considérée (voir Fig. 6.1).

FIGURE 6.1 – Illustrations des trois ensembles \mathcal{N} (ensemble des solutions continues), \mathcal{N}_d (ensemble des solutions discrétisées) et \mathcal{N}_v (ensembles des solutions dont la dynamique ne met pas en défaut la discrétisation). Ces trois ensembles sont liés par deux projections P_d et P_v .

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \mathcal{N}_d = \mathcal{N},$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \mathcal{N}_v = \mathcal{N}$$



Ce dernier filtre est crucial. Très souvent il n'est pas explicitement défini dans le code. Cette limite implicite ne permet pas de déterminer le domaine de validité de l'outil en mélangeant erreurs numériques et phénomènes physiques. Cela conduit au mieux à une forte restriction des domaines d'utilisation d'outils numériques et au pire, à une accumulation d'erreurs dans les simulations. A l'inverse, l'utilisation de la projection P_v améliore sensiblement la performance du code telle que mesurée par PoPe ainsi que les réductions de modèle.

Dialogue entre différents niveaux de description

Les codes réduits ayant un faible coût de simulation permettent de faire un grand nombre de simulations pour s'assurer de la robustesse d'un résultat ou pour explorer le portrait de phase d'un modèle. Dans le premier cas, les simulations étudiées décrivent un régime précis que l'on souhaite caractériser ainsi que sa probabilité d'occurrence. Dans le second cas on s'intéresse à la variété des régimes accessibles par le système et aux éventuelles transitions qui les connectent. L'utilisation de simulations plus précises ou de modèles plus riches sert alors à apporter des mesures quantitatives à un résultat robuste ou à faire apparaître de nouvelles transitions entre deux états non connectés sans un ingrédient de physique particulier. A l'inverse, les codes plus complets peuvent aussi avoir un rôle d'exploration en mettant en évidence des nouveaux phénomènes que l'on cherchera ensuite à capter avec des modèles réduits, potentiellement aidés par la méthode PoPe.

Ce dialogue entre différents niveaux de réduction peut être atteint au sein d'un unique modèle et d'un unique code en utilisant une projection sur un nombre réduit de degrés de liberté avec le filtre P_v . L'utilisation de ce filtre permet un compromis entre réalisme et coût de simulation en gardant la maîtrise de l'erreur numérique.

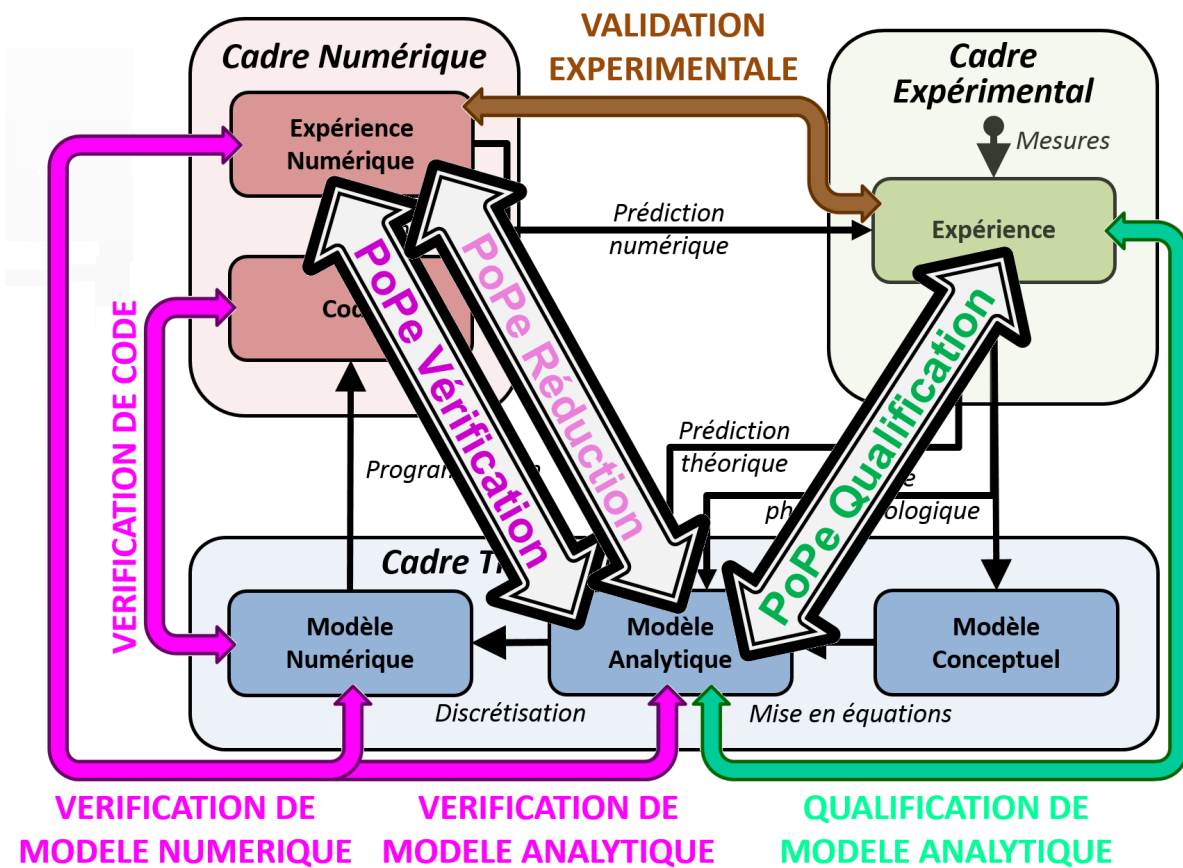


FIGURE 6.2 – Mise en évidence du processus de vérification, qualification et validation autour de l'expérience numérique et de l'expérience "réelle". Flèches violettes : vérifications, flèche verte : qualification, flèche marron : validation. Bloc vert : cadre expérimental (réalité), bloc bleu : cadre théorique (physique et mathématiques), bloc rouge : cadre numérique (informatique). La méthode de vérification PoPe présentée dans le chapitre 2 permet la vérification de code (via la vérification de modèles numériques et modèles analytiques), la réduction de modèles et la qualification de modèles. Ces fonctions permettent de définir précisément les relations entre chaque étape du processus de simulation.

Lien entre chaos et transport turbulent

Le niveau de viscosité du modèle implémenté dans TOKAM2D contrôle un équivalent du nombre de Reynolds, ce qui détermine l'organisation globale du système et son degré de chaos. Ce degré de chaos est mesuré en utilisant l'exposant de Lyapunov qui traduit la séparation exponentielle de deux états initialement proches. Trois mesures de ce critère sont utilisées : 1) le Lyapunov de traceurs passifs met en évidence deux régimes de chaos et un régime diffusif, 2) l'exposant local d'exponentiation déterminé à partir du potentiel électrique permet d'explorer l'organisation spatiale du chaos, enfin 3) la divergence de deux simulations identiques, à un bruit blanc de faible amplitude près, permet d'obtenir un critère global et direct. Ces trois critères différents sont en accord qualitatif sur la plage de valeurs testées. Ils mettent en évidence l'existence d'un maximum d'efficacité du transport turbulent qui est atteint en même temps qu'un degré de chaos intermédiaire. Pas assez de chaos ne permet pas à la turbulence de se développer, trop de chaos homogénéise le système aux échelles intermédiaires et réduit le transport balistique dans la direction radiale. Il est à souligner que la méthode PoPe permet de retrouver les équations utilisées qui restent tout à fait déterministes malgré le chaos.

Auto organisation de la turbulence

Le modèle de la turbulence d'ions piégés de TERESA est caractérisé par l'existence de deux régimes de transport, l'un fort et l'autre nul. La partition entre ces régimes ne dépend pas du forçage du système mais d'une longueur caractéristique et d'un paramètre λ introduit pour modéliser le comportement de particules adiabatiques. J'ai pu attribuer à une accumulation d'erreurs numériques l'existence d'un troisième régime de transport intermittent précédemment publié. L'absence de ce troisième régime rend le code TERESA singulier parmi les codes dédiés à l'étude de la micro-turbulence. Pour comprendre cette singularité, j'ai cherché les ingrédients physiques absents du modèle mais dont la prise en compte permettait de retrouver l'intermittence. La prise en compte des variations de la température dans l'équation de quasi neutralité permet aux deux régimes d'exister en forçage par les bains thermiques et à un troisième régime de transport intermittent d'apparaître en forçage par le flux. L'organisation des écoulements zonaux dans ce troisième régime est proche du régime "isolant" mais un transport intermittent parvient à s'établir. L'ajout d'une contribution d'origine collisionnelle dans l'équation de Vlasov a aussi permis d'introduire un régime différent, avec un transport sous forme balistique. Dans le cas d'une configuration streamers permettant un transport efficace sans collision, les collisions changent la nature du transport tout en le diminuant. L'extension du modèle de TERESA à l'utilisation de plusieurs espèces devrait permettre de revenir sur le sens du paramètre λ et sur la possibilité de décrire le régime adiabatique avec cette approximation.

Un point de vue sur la démarche de modélisation

Mon expérience d'ingénieur en mathématiques appliquées dans mon parcours de recherche sur la turbulence plasma, comprenant l'écriture d'outils de simulation, m'a conduit au point de vue suivant.

Il est indispensable d'utiliser des outils vérifiés, surtout pour étudier de nouveaux phénomènes. La vérification de code pour un numéricien fait partie d'une hygiène élémentaire. Vérifier empêche d'attribuer à la Physique un phénomène nouveau déclenché par des erreurs numériques. Inversement, cela peut aussi amener à considérer un résultat inattendu que l'on aurait pu prendre pour un artefact numérique. Cette recherche de qualité permet d'aborder en confiance l'utilisation d'un code de calcul ce qui améliorera l'expérience de l'utilisateur.

La puissance de calcul à laquelle j'ai eu accès avec le mésocentre d'Aix-Marseille Université et les améliorations que j'ai apportées à TERESA m'ont permis de changer la manière d'utiliser mes simulations en explorant directement le portrait de phase du code. Les nombreuses simulations que j'ai réalisées pour cela sont facilement soumises en parallèle puis analysées par des post-traitements automatisés. Cette approche systématique m'a semblé naturelle et puissante pour mettre en évidence de nouveaux régimes ou de nouvelles transitions afin de prendre du recul sur le modèle.

Perspectives ouvertes par PoPe

La méthode PoPe est aujourd'hui la contribution la plus originale et prometteuse de ce manuscrit. Cette méthode se veut être une première étape vers une nécessaire simplification et systématisation de la vérification. Pour élargir son utilisation, des pistes d'un formalisme plus complet et plus souple sont explorées dans l'annexe C mais l'élément le plus critique semble être l'utilisation d'un filtre pour contrôler les erreurs induites par les schémas numériques. Cet élément est à prendre en considération par la communauté des mathématiques appliquées pour déterminer au mieux les limites de toute méthode numérique. Si une méthode numérique va de pair avec un filtre, comme par exemple l'anti-aliasing des méthodes spectrales (avantageusement alliées à la pénalisation) ou des techniques de seuillage pour les méthodes basées sur une décomposition en ondelettes [Sweldens 2000], le choix du filtre est simple. Pour d'autres approches comme les méthodes Semi-Lagrangiennes, la construction de filtres génériques semble nécessaire. La vérification des codes GYSELA [Grandgirard 2007, Grandgirard 2008] et TOKAM3X [Tamain 2014, Tamain 2015] pose ces questions dans un contexte HPC et oriente les recherches dans la direction des ondelettes. Elles semblent être le meilleur candidat pour répondre à toutes les contraintes de précision et temps de calcul. La question du développement d'une bibliothèque dédiée au traitement PoPe, avec une approche "en ligne" ou "hors ligne", ne se poserait qu'après. Enfin, une question que j'ai laissée ouverte est la détermination, a priori, de l'impact en terme de physique des erreurs numériques que

la méthode PoPe capte. Malheureusement il ne semble pas exister de relation simple prédisant les conséquences d'erreur numérique car, pour une méthode numérique donnée, la structure de l'erreur et ses conséquences peuvent fortement varier selon les régimes physiques. Cependant, la prédiction des conséquences des erreurs numériques pourrait permettre d'en tolérer certaines. En l'absence de telles règles, et a fortiori pour l'étude de tout nouveau phénomène, il est dans un premier temps nécessaire de contrôler au mieux l'erreur, quitte à relâcher la contrainte du filtre dans un deuxième temps.

Concernant la réduction de modèles, il me semble nécessaire de passer à des applications "grandeur nature" pour que la méthode soit adoptée par la communauté de la physique. PoPe peut avantageusement faire dialoguer différents points de vue autour de questions telles que 1) l'enrichissement des fermetures fluides (de codes tels que TOKAM3X) grâce à l'étude de simulations premiers principes (de codes tels que GYSELA) ; ou encore 2) l'enrichissement des codes de transport (tels que SOLEDGE [Bufferand 2011, Bufferand 2013]) grâce à l'étude de la turbulence 3D (simulée par TOKAM3X). J'espère y contribuer en proposant ma compréhension de la méthode PoPe.

Illustrations de TOKAM 2D

Sommaire

A.1	Espace réel	153
A.2	Espace de Fourier	153
A.3	Potentiel électrique ϕ	153
A.4	Impact de Δt_{PoPe}	153
A.5	Visualisation des résidus dans l'espace réel	153

A.1 Espace réel

Voir Fig. A.1

A.2 Espace de Fourier

Voir Fig. A.2 et Fig. A.3

A.3 Potentiel électrique ϕ

Voir Fig. A.4

A.4 Impact de Δt_{PoPe}

Voir Fig. A.5

A.5 Visualisation des résidus dans l'espace réel

Voir Fig. A.6

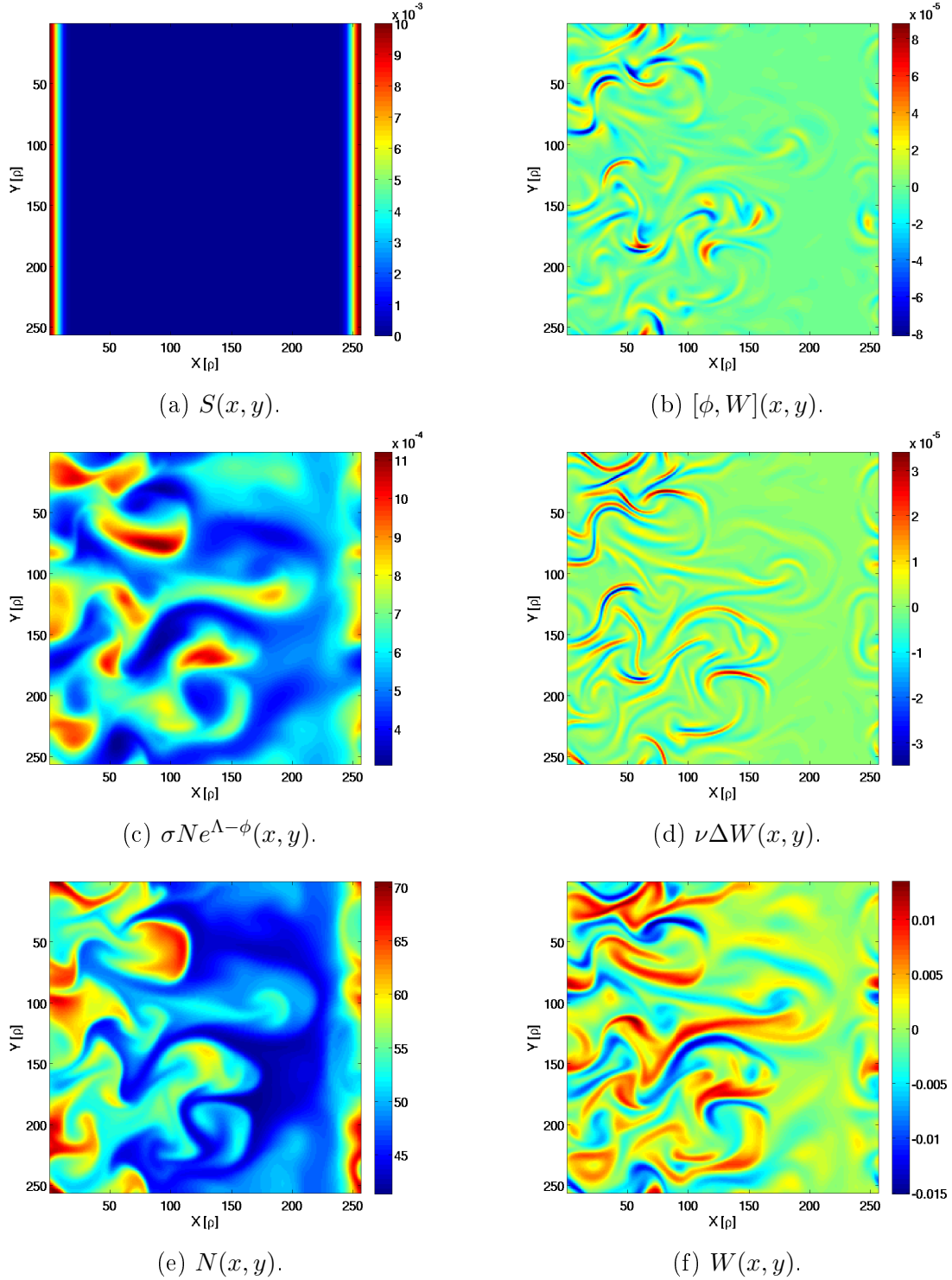


FIGURE A.1 – Illustrations dans l'espace réel de différents opérateurs d'une simulation typique du code TOKAM2D. Voir 2.7 pour les autres termes.

($\mathbf{D} = \boldsymbol{\nu} = 0.01$, $\boldsymbol{\sigma} \simeq 1.14 \times 10^{-5}$, $\mathbf{S}_0 = 0.01$, $\mathbf{g} \simeq 5.72 \times 10^{-4}$, $L_x = L_y = 256 \rho$),
 ($N_x = N_y = 256$, $\Delta t = 1\omega_0$). Simulation type S1 (tab. 2.1).

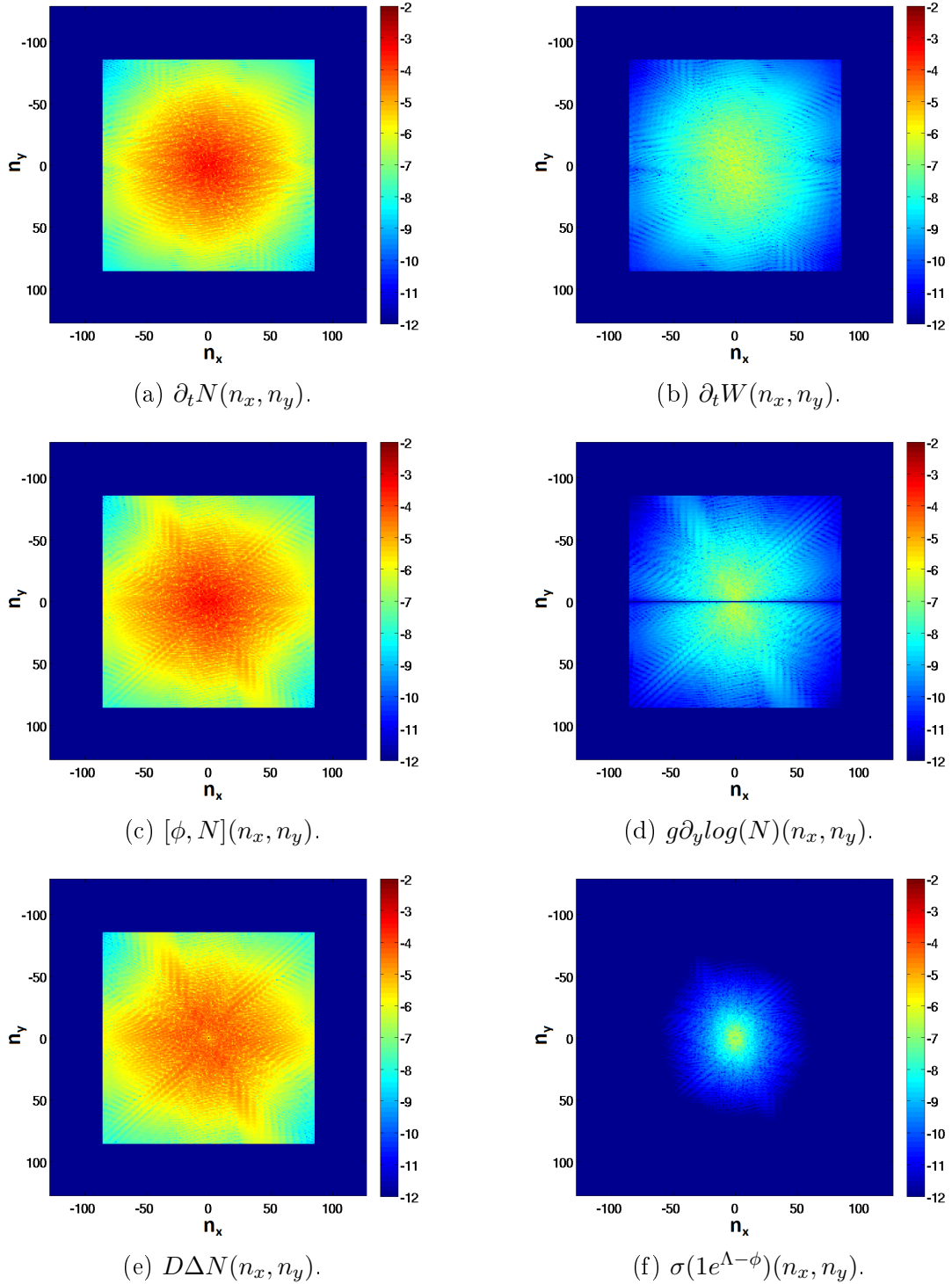


FIGURE A.2 – Illustrations dans l'espace de Fourier de différents opérateurs d'une simulation typique du code TOKAM2D. (Données identique à la planche Fig. 2.7 dans l'espace réel), ($\mathbf{D} = \boldsymbol{\nu} = 0.01$, $\boldsymbol{\sigma} \simeq 1.14 \times 10^{-5}$, $\mathbf{S}_0 = 0.01$, $\mathbf{g} \simeq 5.72 \times 10^{-4}$, $L_x = L_y = 256 \rho$), ($N_x = N_y = 256$, $\Delta t = 1\omega_0$). Simulation type S1 (tab. 2.1).

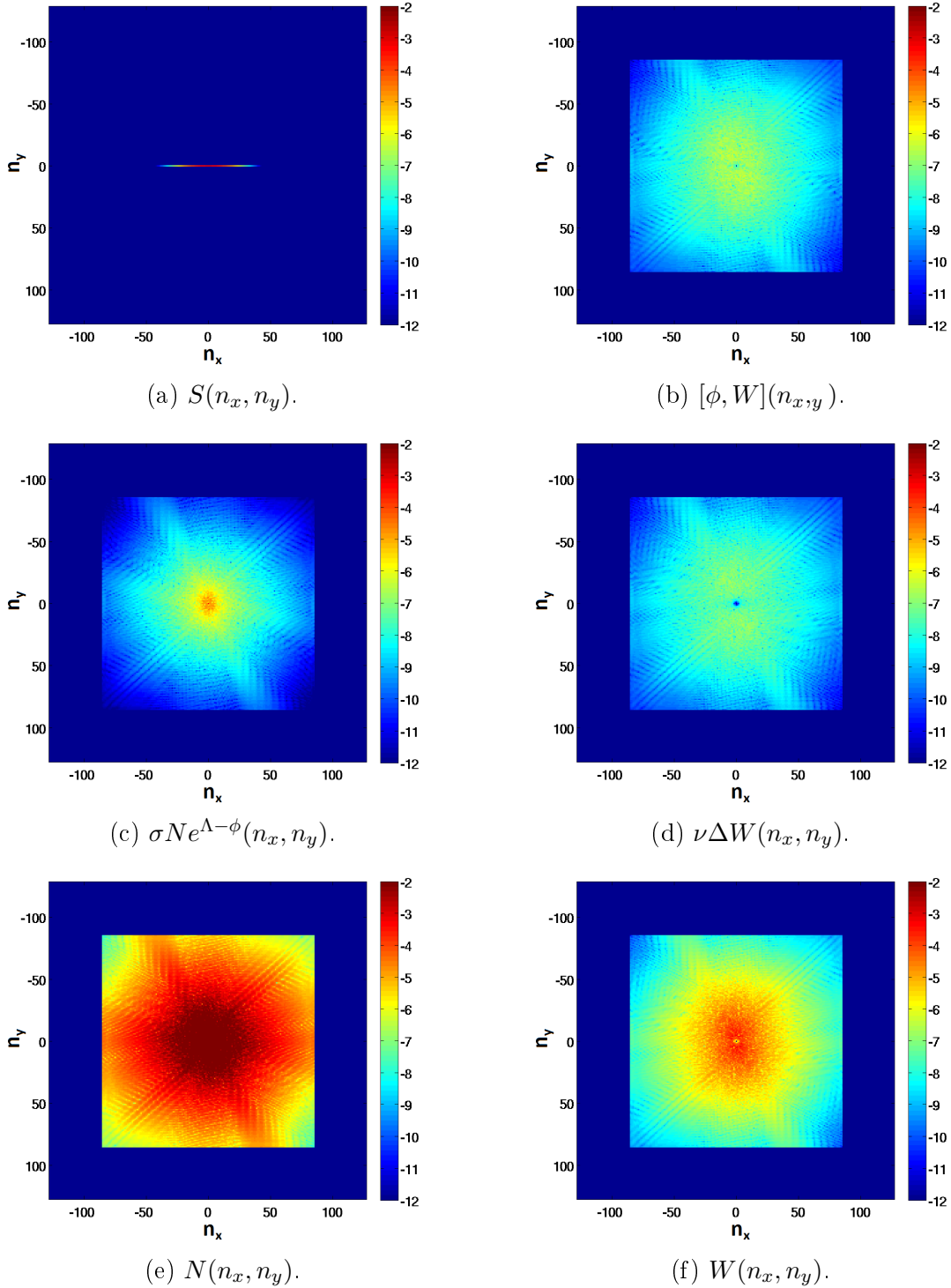


FIGURE A.3 – Illustrations dans l'espace de Fourier de différents opérateurs d'une simulation typique du code TOKAM2D. (Données identique à la planche Fig. A.1 dans l'espace réel), ($\mathbf{D} = \nu = 0.01$, $\sigma \simeq 1.14 \times 10^{-5}$, $\mathbf{S}_0 = 0.01$, $\mathbf{g} \simeq 5.72 \times 10^{-4}$, $L_x = L_y = 256 \rho$), ($N_x = N_y = 256$, $\Delta t = 1\omega_0$). Simulation type S1 (tab. 2.1).

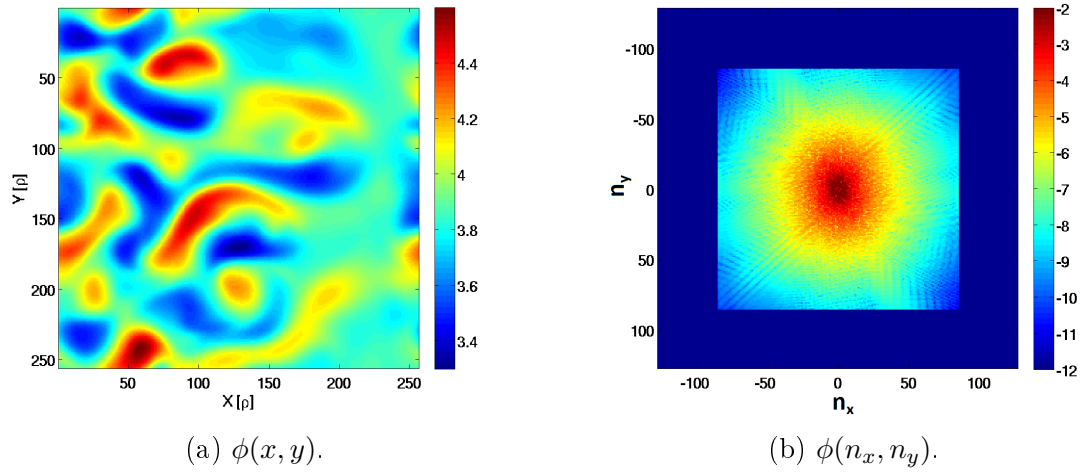


FIGURE A.4 – Illustrations dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier de la variable ϕ ($\mathbf{D} = \boldsymbol{\nu} = 0.01$, $\boldsymbol{\sigma} \simeq 1.14 \times 10^{-5}$, $\mathbf{S}_0 = 0.01$, $\mathbf{g} \simeq 5.72 \times 10^{-4}$, $L_x = L_y = 256 \rho$), ($N_x = N_y = 256$, $\Delta t = 1\omega_0$). Simulation type S1 (tab. 2.1).

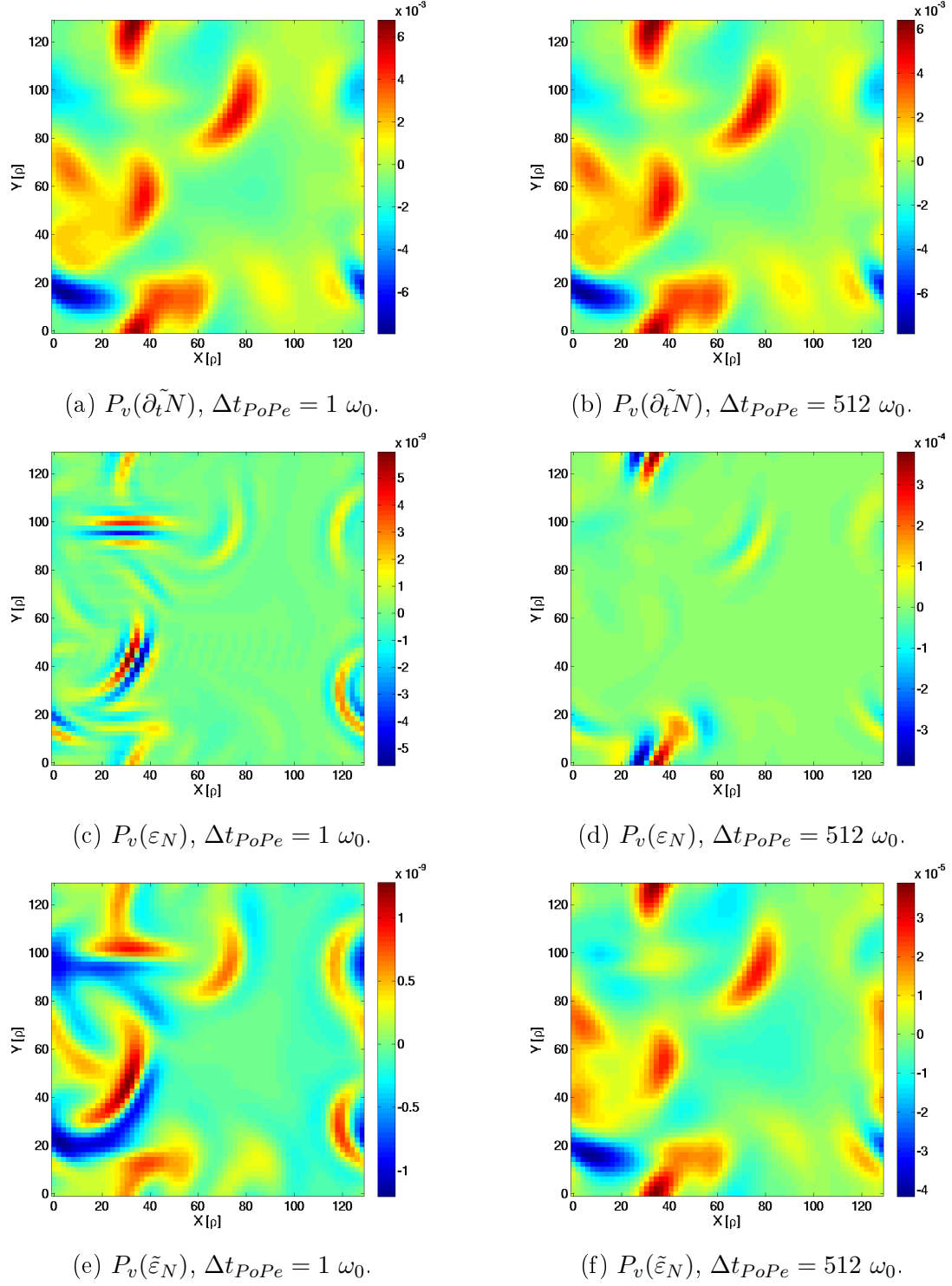


FIGURE A.5 – Illustration $P_v(\partial_t \tilde{N})$, $P_v(\varepsilon_N)$ et $P_v(\tilde{\varepsilon}_N)$ pour deux valeurs de Δt_{PoPe} : $1 \omega_0$ pour la colonne de gauche, $512 \omega_0$ pour la colonne de droite. Simulation type S2 (tab. 2.1) sauf $\Delta t = 1 \omega_0$.

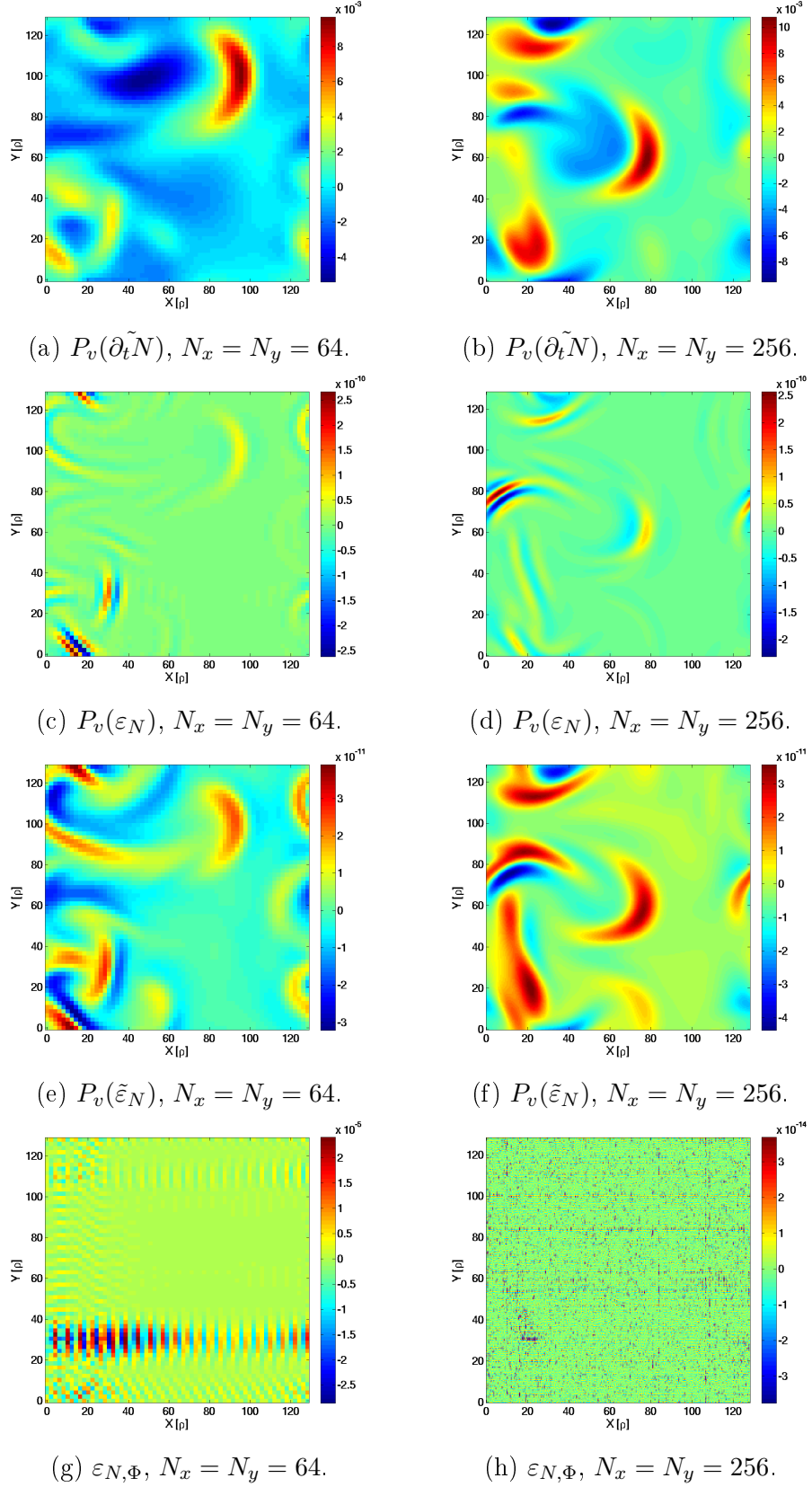


FIGURE A.6 – Illustration $P_v(\partial_t \tilde{N})$, $P_v(\varepsilon_N)$, $P_v(\tilde{\varepsilon}_N)$ et $\varepsilon_{N,\Phi}$ pour deux valeurs de résolution $N_x = N_y = N$: $N = 64$ pour la colonne de gauche, $N = 256$ pour la colonne de droite. Simulation type S2 (tab. 2.1).

Éléments de codes pour PoPe

B.1 Calcul de dérivée temporelle pour PoPe

Version Fortran "en ligne" :

```

! finite difference coef
w_DF_m2 = 1.0 / (12.0 * dt_DF)
w_DF_m1 = -8.0 / (12.0 * dt_DF)
! w_DF_0 = 0.0
w_DF_1 = 8.0 / (12.0 * dt_DF)
w_DF_2 = -1.0 / (12.0 * dt_DF)

! time toward the next saving (futur)
delta_m2 = modulo(t + 2.0 * dt_DF, dt_diag)
delta_m1 = modulo(t + 1.0 * dt_DF, dt_diag)
delta_1 = modulo(t - 1.0 * dt_DF, dt_diag)
delta_2 = modulo(t - 2.0 * dt_DF, dt_diag)

! minimum time from the nearest saving (future or past)
delta_m2 = min(delta_m2, dt_diag - delta_m2)
delta_m1 = min(delta_m1, dt_diag - delta_m1)
delta_1 = min(delta_1, dt_diag - delta_1)
delta_2 = min(delta_2, dt_diag - delta_2)

if (delta_m2 .lt. eps) X_dt = w_DF_m2 * X

if (delta_m1 .lt. eps) X_dt = X_dt + w_DF_m1 * X

if (delta_1 .lt. eps) X_dt = X_dt + w_DF_1 * X

if (delta_2 .lt. eps) then
    X_dt = X_dt + w_DF_2 * X
    write_on_disk(X_dt)
end do

```

B.2 Calcul d'opérateurs de TOKAM2D pour PoPe

Version Matlab "hors ligne" :

```
% compute partial derivatives
PX=derivee1(P',Lx/Nx,methode)';
PY=derivee1(P,Ly/Ny,methode);
NX=derivee1(N',Lx/Nx,methode)';
NY=derivee1(N,Ly/Ny,methode);
NXX=derivee2(N',Lx/Nx,methode)';
NYY=derivee2(N,Ly/Ny,methode);

% Poisson brackets
Poisson_N = PX.*NY-PY.*NX;
% Diffusion
diffusion_N = NXX+NYY;
% Curvature
Curve_N = derivee1(log(N),Ly/Ny,methode);
% Source
Source_N = exp((r-r0)^2/L_s);
% Sink
Sink_N = N.*exp(Lambda-P);
```

B.3 Assemblage et résolution du système PoPe

Version Matlab "hors ligne" :

```
Nv = 4 ; % number of operators
Np = nb_x*nb_y*nb_t ; % number of points in each tested set
A = zeros(Np, Nv) ; % allocation of memory
b = zeros(Np, 1) ;

% assembling A
A(:,1) = reshape(Poisson_N(1:nb_x,1:nb_y,1:nb_t), Np,1);
A(:,2) = reshape(Diffusion_N(1:nb_x,1:nb_y,1:nb_t), Np,1);
A(:,3) = reshape(Source_N(1:nb_x,1:nb_y,1:nb_t), Np,1);
A(:,4) = reshape(Sink_N(1:nb_x,1:nb_y,1:nb_t), Np,1);

% assembling RHS
b(:) = reshape(dt_N(1:nb_x,1:nb_y,1:nb_t), Np,1);

% solving (A'A) alpha = A' b
alpha = (A'*A) \ (A'*b);
```

Généralisation et formalisme alternatif pour la méthode PoPe

Le formalisme introduit section 2.5.4 peut gagner en puissance à l'aide d'une généralisation simple. Pour comprendre cette nouvelle étape, il est important de penser le problème de vérification eq.(2.12) comme un problème en dimension 8. Jusqu'à présent nous avons décomposé le modèle recherché en une somme (linéaire) d'opérateurs (potentiellement non linéaires). Il était alors question de retrouver, à partir de l'équation eq.(2.1), les 8 poids constants $\alpha_N = (-1_{[\phi, N]}, \mathbf{D}, -\sigma, \mathbf{S}_0, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})$ définissant un hyperplan dans l'hyperespace $([\phi, N], \Delta N, Ne^{\Lambda-\phi}, \mathcal{S}, [\phi, W], \Delta W, \partial_y \log(N), (1 - e^{\Lambda-\phi}))$ de dimension 8. Ce problème est parfaitement résolu par l'utilisation d'un système matriciel linéairement résolu : dans le cas de la vérification de codes, la liste testée est complète ; dans le cas de réduction ou qualification une liste plus longue que nécessaire peut être utilisée car il est facile de déterminer a posteriori quel terme n'appartient pas au modèle recherché. Le coût de calcul est minimum et le résultat riche et précis.

C.1 Les étapes de la méthode PoPe

Je résume PoPe aux étapes suivantes :

1. Effectuer une implémentation simple et relativement peu intrusive d'un diagnostic évaluant des dérivées temporelles dans le cas de la vérification ou la réduction d'un code. Si le code est une boîte noire, PoPe reste utilisable en augmentant la fréquence de sauvegarde (ponctuellement si possible grâce à des redémarrages du code). Pour de la qualification, c'est un diagnostic non numérique qui fournira les données à explorer.
2. Choisir le modèle analytique que l'on souhaite tester. Pour la vérification le modèle testé est celui des équations implémentées dans le code. Pour la réduction de modèles, il faut déterminer les tenants et les aboutissants de cet effort de réduction pour définir le modèle réduit en adéquation avec le but poursuivi. Pour l'étude de comportements expérimentaux (de la qualification) on teste un ensemble de modèles vraisemblables. Des relations d'égalités et d'inégalités peuvent être utilisées.
3. Mettre en évidence la partie inconnue du problème qui est composée, dans le formalisme introduit, des poids associés aux différents opérateurs α . Mettre en évidence la partie postulée, c'est-à-dire la liste des opérateurs O_i et enfin les données du problème qui sont, dans le cas TOKAM2D, les séries temporelles N , W , ϕ , $\partial_t N$ et $\partial_t W$.

4. Assembler un système pour évaluer les inconnues. La simple somme d'opérateurs utilisée ici est parfaitement décrite par un système matriciel (eq.(2.29)).
5. Résoudre numériquement le système obtenu à l'étape précédente. Dans l'approche présentée, il semble préférable d'utiliser les moindres carrés, les systèmes sont alors de petite taille et un algorithme direct suffit. Toute la panoplie habituelle de solveurs reste utilisable.
6. Étudier les résultats obtenus : les poids $\tilde{\alpha}$ et le résidu $\tilde{\varepsilon}$.

C.2 Premiers pas vers un formalisme plus puissant

Le formalisme actuel est manifestement suffisant pour permettre la vérification de code. Pour aller plus loin au niveau de la réduction de codes et de la qualification de modèles, chaque étape peut être poussée à un niveau supérieur dans le but de retrouver des modèles plus complexes dans un contexte plus bruité, sans nécessiter une quantité démesurée de données ni faire exploser la combinatoire des modèles testés.

1. Utiliser une source d'information alternative ou additionnelle peut être intéressant. Par exemple TOKAM2D implémente le jeu d'équations eq.(2.1, 2.2, 2.3) mais cet outil est aussi capable de résoudre le jeu eq. $(\partial_t(2.1), \partial_t(2.2), 2.3)$. Ces nouvelles équations ont pour inconnues $\partial_t^2 N$ et $\partial_t^2 W$. De telles équations sont analytiques, vérifiables en chaque point du maillage à tout instant, avec autant de degrés de liberté que les équations d'origine. Au lieu d'utiliser la dérivée première en temps de N et W , il suffit de mesurer les dérivées secondes.
2. L'étape précédente modifie en conséquence le modèle analytique à tester. Si vérifier les équations des dérivées premières ou des dérivées secondes en temps ne change que peu le résultat de cette étape, l'utilisation de deux sources d'information en simultané pourra enrichir la résolution, surtout dans le cas où peu de points de mesure fiables sont disponibles. Il en va de même pour l'ajout de contraintes d'optimisation ou d'égalité sous forme d'éventuel bilan.
3. La séparation entre la partie inconnue et la partie postulée du système n'est pas unique. Dans le cas de TOKAM2D, il est envisageable d'étendre les dimensions $([\phi, N], \Delta N)$ à $(\partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_x N, \partial_y N, \partial_x^2 N, \partial_y^2 N)$ et de façon similaire pour $([\phi, W], \Delta W)$. L'expansion des dimensions (ΔN) et (ΔW) resterait exprimable sous la forme d'une somme (donc linéaire) d'opérateurs tout en apportant un peu plus d'information sur la qualité des dérivées estimées par le code dans les deux directions x et y . L'expansion des crochets de Poisson change la nature des inconnues recherchées : l'inconnue n'est plus un vecteur de scalaires, l'inconnue contient maintenant les produits $\partial_x \phi \times \partial_y N$ et $\partial_x N \times \partial_y \phi$ (idem pour W). La solution de cette nouvelle expansion n'est plus un hyperplan mais une hypersurface. L'équation de cette surface reste quadratique mais pourrait devenir encore plus non-linéaire dans le cas où l'hyperespace deviendrait simplement (N, W) . PoPe devrait alors trouver la variable intermédiaire ϕ et établir les expressions fortement non-linéaires des puits et sources.

4. Les nouvelles limites entre connu et inconnu demandent de nouvelles mises en forme pour déterminer ces inconnues plus riches. Ce ne sont plus uniquement des poids mais des fonctions. Pour la première alternative présentée, un recours aux splines permettra de prendre en compte la nouvelle forme polynomiale de l'inconnue recherchée. Cette méthode a l'avantage de toujours utiliser la résolution d'un système matriciel linéaire mais agrandit considérablement la taille de ce système. Des contraintes d'inégalité peuvent encore être incluses. Pour la seconde alternative, c'est à des formalismes fortement non-linéaires qu'il faudra faire appel. J'ai brièvement testé de petits réseaux de neurones avec des résultats encourageant.
5. Les nouveaux systèmes à résoudre augmentant en taille et complexité, de nouvelles procédures pour les résoudre sont nécessaires. La résolution itérative, voire parallèle, pour les systèmes linéaires est possible. Pour les réseaux de neurones, j'ai testé des algorithmes génériques facilement parallélisables mais extrêmement gourmands. J'ai cherché à multiplier les couches de neurones pour diminuer le nombre total de neurones sans franc succès. Avec le recul, l'utilisation de méthodes comme les "radial basis functions" m'aurait aussi permis d'obtenir une information fortement non linéaire mais en gardant une formulation matricielle pour résoudre le problème.
6. L'étude des poids $\tilde{\alpha}$ et du résidu $\tilde{\varepsilon}$ permet une excellente caractérisation d'un code. Pour aller plus loin en terme de physique, il est intéressant d'utiliser le diagnostic ∂_t pour estimer des taux de croissance tout en détaillant leur constitution. Soit l'équation eq.(C.1) équivalente à l'équation eq.(2.12) dans l'espace de Fourier (la notation $\overbrace{\cdot}^{k_x, k_y}$ définit le coefficient de Fourier du mode k_x, k_y).

$$\overbrace{\partial_t N}_{k_x, k_y} = \overbrace{[\phi, N]}_{k_x, k_y} + D \overbrace{\Delta N}_{k_x, k_y} + \overbrace{N e^{\Lambda - \phi}}_{k_x, k_y} + S_0 \overbrace{\mathcal{S}}_{k_x, k_y} \quad (\text{C.1})$$

Grâce à une simple division de $\overbrace{\partial_t N}_{k_x, k_y}$ par \overbrace{N}_{k_x, k_y} , on obtient une mesure précise de la contribution de chaque opérateur au taux de croissance d'un mode donné :

$$\frac{\overbrace{\partial_t N}_{k_x, k_y}}{\overbrace{N}_{k_x, k_y}} = \frac{\overbrace{[\phi, N]}_{k_x, k_y}}{\overbrace{N}_{k_x, k_y}} + \frac{D \overbrace{\Delta N}_{k_x, k_y}}{\overbrace{N}_{k_x, k_y}} + \frac{\overbrace{N e^{\Lambda - \phi}}_{k_x, k_y}}{\overbrace{N}_{k_x, k_y}} + \frac{S_0 \overbrace{\mathcal{S}}_{k_x, k_y}}{\overbrace{N}_{k_x, k_y}} = \gamma_{k_x, k_y} \quad (\text{C.2})$$

L'estimation de divers couplages et échanges est aussi possible. Enfin, les développements de post-traitements de PoPe peuvent ouvrir un autre horizon dans l'approche de l'étude d'un système. Soit la vision suivante du déroulement chronologique d'une simulation de micro-turbulence :

Instant initial : l'instant $t = 0$ où le système est généralement défini par un équilibre auquel on additionne une perturbation initiale. L'équilibre analytique n'est pas nécessairement représentatif des étapes suivantes.

Phase linéaire (optionnelle) : dans le cas d'une initialisation utilisant un équilibre, une phase faiblement non linéaire se produit. Cette phase semble artificielle dans l'étude d'un plasma car l'étape précédente est artificielle dans la mesure

où la probabilité de se trouver dans cette situation idéale est nulle. Cependant, elle permet une étude sur la stabilité du système.

Phase transitoire : une phase non linéaire transitoire met en place un ensemble de mécanismes d'auto organisation. Cette phase est plus riche que la précédente sans pour autant être représentative de l'état final du système.

Phase de pseudo équilibre : la dernière phase constituerait l'attracteur sur lequel le système se déplacerait librement, une fois qu'il aurait oublié ses conditions initiales grâce au chaos. Malheureusement, cet attracteur peut ne pas être atteint pour des raisons de coût de calcul. Il peut aussi ne pas être représentatif du système réel que l'on cherche à modéliser à cause de conditions aux bords irréalistes et qui pénétreraient trop dans le système.

Une fois qu'une simulation a atteint la quatrième phase, la partie post traitement de PoPe peut être utilisée pour explorer l'attracteur sans chercher à effectuer d'intégration temporelle. En perturbant le système mesuré, en le modifiant légèrement, on peut étudier le voisinage de l'attracteur, l'espace entre deux lignes de temps. On peut chercher si l'attracteur possède une branche ou plusieurs et quel serait l'excitation qui permettrait de passer d'une branche à l'autre (d'un mode L à un mode H).

Paramètres des simulations TERESA

Paramètres	N_α	N_ψ	N_κ	N_E	E_{max}	Δt
Valeurs de référence	257	129	1	48	20	$[10^{-5} : 10^{-2}]$
Intervalles	[129 : 4097]	[129 : 513]	[1]	[48 : 144]	[15 : 50]	$[10^{-8} : 10^{-2}]$

TABLE D.1 – Paramètres définissant les discrétisations utilisées pour TERESA.

Paramètres	ΔT	S_0	ε
Valeurs de référence	0.5	TB	10^{-4}
Intervalles	[0.125 : 2]	TB/FD [0 : 1]	$[10^{-6} : 10^{-2}]$

TABLE D.2 – Paramètres de contrôle dit externes : écart de température en forçage par les bains thermiques, intensité de la source en forçage par le flux et amplitude de la perturbation initiale.

Paramètres	λ	ρ_c	δ_b	Ω_d	C_i	C_e
Valeurs de référence	1	0.06	0.03	1	0.1	0.1
Intervalles	[0 : 1]	[0.0003 : 0.12]	[0.003 : 0.12]	[0.1 : 2]		

TABLE D.3 – Paramètres de contrôle dit internes : nature de la réponse des particules adiabatiques, grandeurs caractéristiques du système et fréquence typique de la dynamique.

Bibliographie

- [Abiteboul 2013] J Abiteboul, Ph Ghendrih, V Grandgirard, T Cartier-Michaud, G Dif-Pradalier, X Garbet, G Latu, C Passeron, Y Sarazin, A Strugarek, O Thomine and D Zarzoso. *Turbulent momentum transport in core tokamak plasmas and penetration of scrape-off layer flows*. Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 55, no. 7, page 074001, 2013.
- [Bautista-Gomez 2011] Leonardo Bautista-Gomez, Seiji Tsuboi, Dimitri Komatitsch, Franck Cappello, Naoya Maruyama and Satoshi Matsuoka. *FTI : High Performance Fault Tolerance Interface for Hybrid Systems*. In Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC '11, pages 32 :1–32 :32, New York, NY, USA, 2011. ACM.
- [Bénard 1901] H. Bénard. *Tourbillons cellulaires dans une nappe liquide transportant de la chaleur par convection en régime permanent*. Ann. Chim. Phys., series 7, vol. 23, pp. 62-144, 1901.
- [Brizard 2007] A. J. Brizard and T. S. Hahm. *Foundations of nonlinear gyrokinetic theory*. Rev. Mod. Phys., vol. 79, pages 421–468, Apr 2007.
- [Bufferand 2011] H. Bufferand, G. Ciraolo, L. Isoardi, G. Chiavassa, F. Schwander, E. Serre, N. Fedorczak, Ph. Ghendrih and P. Tamain. *Applications of SOLEDGE-2D code to complex SOL configurations and analysis of Mach probe measurements*. Journal of Nuclear Materials, vol. 415, no. 1, Supplement, pages S589 – S592, 2011. Proceedings of the 19th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion.
- [Bufferand 2013] H. Bufferand, B. Bensiali, J. Bucalossi, G. Ciraolo, P. Genesio, Ph. Ghendrih, Y. Marandet, A. Paredes, F. Schwander, E. Serre and P. Tamain. *Near wall plasma simulation using penalization technique with the transport code SolEdge2D-Eirene*. Journal of Nuclear Materials, vol. 438, Supplement, pages S445 – S448, 2013. Proceedings of the 20th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices.
- [Carreras 1996] B. A. Carreras, C. Hidalgo, E. Sánchez, M. A. Pedrosa, R. Balbín, I. García-Cortés, B. van Milligen, D. E. Newman and V. E. Lynch. *Fluctuation-induced flux at the plasma edge in toroidal devices*. Physics of Plasmas, vol. 3, no. 7, pages 2664–2672, 1996.
- [Cartier-Michaud 2013] T Cartier-Michaud, Ph Ghendrih, V Grandgirard and G. Latu. *Optimizing the parallel scheme of the Poisson solver for the reduced kinetic code TERESA**. ESAIM : Proc., vol. 43, pages 274–294, 2013.
- [Cartier-Michaud 2014] T Cartier-Michaud, P Ghendrih, Y Sarazin, G Dif-Pradalier, T Drouot, D Estève, X Garbet, V Grandgirard, G Latu, C Norscini and C Passeron. *Staircase temperature profiles and plasma transport self-organisation in a minimum kinetic model of turbulence based on the trapped ion mode instability*. Journal of Physics : Conference Series, vol. 561, no. 1, page 012003, 2014.

- [Christophe Denis 2012] Sethy Montan Christophe Denis. *NUMERICAL VERIFICATION OF INDUSTRIAL NUMERICAL CODES*. HAL, 2012.
- [Coq] *Reference Manual of The Coq Proof Assistant INRIA*.
- [Courant 1928] R. Courant, K. Friedrichs and H. Lewy. *Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik*. Mathematische Annalen, vol. 100, no. 1, pages 32–74, 1928.
- [Crank 1996] J. Crank and P. Nicolson. *A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type*. Advances in Computational Mathematics, vol. 6, no. 1, pages 207–226, 1996.
- [Crouseilles 2010] N. Crouseilles, M. Mehrenberger and Hocine Sellama. *Numerical solution of the gyroaverage operator for the finite gyroradius guiding-center model*. CICP, page 1, 2010.
- [Darmet 2006] G. Darmet, Ph. Ghendrih, Y. Sarazin, X. Garbet and V. Grandgirard. *Intermittency in flux driven kinetic simulations of trapped ion turbulence*. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, vol. 13, no. 1, pages 53 – 58, 2006. Vlasovia 2006 : The Second International Workshop on the Theory and Applications of the Vlasov Equation.
- [Diamond 1995] P. H. Diamond and T. S. Hahm. *On the dynamics of turbulent transport near marginal stability*. Physics of Plasmas (1994-present), vol. 2, no. 10, pages 3640–3649, 1995.
- [Dif-Pradalier 2015] G. Dif-Pradalier, G. Hornung, Ph. Ghendrih, Y. Sarazin, F. Claret, L. Vermare, H. Diamond P. J. Abiteboul, T. Cartier-Michaud, C. Ehrlacher, D. Estève, X. Garbet, V. Grandgirard, D. Gürçan Ö. P. Hennequin, Y. Kosuga, G. Latu, P. Maget, P. Morel, C. Norcini, R. Sabot and A. Storelli. *Finding the Elusive $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ Staircase in Magnetized Plasmas*. Phys. Rev. Lett., vol. 114, page 085004, Feb 2015.
- [Drouot 2014a] Thomas Drouot, Etienne Gravier, Thierry Reveille, Alain Ghizzo, Pierre Bertrand, Xavier Garbet, Yanick Sarazin and Thomas Cartier-Michaud. *Competition between trapped ion and trapped electron instabilities*. In 41st EPS Conference on Plasma Physics, P2.039, 2014.
- [Drouot 2014b] Thomas Drouot, Etienne Gravier, Thierry Reveille, Alain Ghizzo, Pierre Bertrand, Xavier Garbet, Yanick Sarazin and Thomas Cartier-Michaud. *A gyrokinetic model for trapped electron and ion modes*. The European Physical Journal D, vol. 68, no. 10, 2014.
- [Drouot 2015] Thomas Drouot, Etienne Gravier, Thierry Reveille, Alain Ghizzo, Pierre Bertrand, Thomas Cartier-Michaud, Philippe Ghendrih, Xavier Garbet and Yanick Sarazin. *Global gyrokinetic simulations of TEM and TIM microturbulence*. Phys. of Plasmas, 2015.
- [Floriani 2013] E Floriani, G Ciraolo, Ph Ghendrih, R Lima and Y Sarazin. *Self-regulation of turbulence bursts and transport barriers*. Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 55, no. 9, page 095012, 2013.

- [F.R.S. 1916] Lord Rayleigh O.M. F.R.S. *LIX. On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side.* Philosophical Magazine Series 6, vol. 32, no. 192, pages 529–546, 1916.
- [Fullmer 2014] William D. Fullmer, Martin A. Lopez de Bertodano, Min Chen and Alejandro Clausse. *Analysis of stability, verification and chaos with the Kreiss–Yström equations.* Applied Mathematics and Computation, vol. 248, no. 0, pages 28 – 46, 2014.
- [Garbet] X. Garbet. *Instabilités, turbulence, et transport dans un plasma magnétisé.* PhD thesis, CEA Cadarache.
- [Garbet 1991] X. Garbet, L. Laurent, J.-P. Roubin and A. Samain. *A model for the turbulence in the scrape-off layer of tokamaks.* Nuclear Fusion, vol. 31, no. 5, page 967, 1991.
- [Garbet 1998] X. Garbet and R. E. Waltz. *Heat flux driven ion turbulence.* Physics of Plasmas (1994-present), vol. 5, no. 8, pages 2836–2845, 1998.
- [Garcia 2006] O E Garcia, J Horacek, R A Pitts, A H Nielsen, W Fundamenski, J P Graves, V Naulin and J Juul Rasmussen. *Interchange turbulence in the TCV scrape-off layer.* Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 48, no. 1, page L1, 2006.
- [Garcia 2013] O.E. Garcia, I. Cziegler, R. Kube, B. LaBombard and J.L. Terry. *Burst statistics in Alcator C-Mod {SOL} turbulence.* Journal of Nuclear Materials, vol. 438, Supplement, no. 0, pages S180 – S183, 2013. Proceedings of the 20th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices.
- [Ghendrih 2003] Ph. Ghendrih, Y. Sarazin, G. Attuel, S. Benkadda, P. Beyer, G. Falchetto, C. Figarella, X. Garbet, V. Grandgirard and M. Ottaviani. *Theoretical analysis of the influence of external biasing on long range turbulent transport in the scrape-off layer.* Nuclear Fusion, vol. 43, no. 10, page 1013, 2003.
- [Grandgirard 2006] V. Grandgirard, M. Brunetti, P. Bertrand, N. Besse, X. Garbet, P. Ghendrih, G. Manfredi, Y. Sarazin, O. Sauter, E. Sonnendrücker, J. Vaclavik and L. Villard. *A drift-kinetic Semi-Lagrangian 4D code for ion turbulence simulation.* vol. 217, no. 2, pages 395 – 423, 2006.
- [Grandgirard 2007] V. Grandgirard, Y. Sarazin, P. Angelino, A. Bottino, N. Crouseilles, G. Darmet, G. Dif-Pradalier, X. Garbet, Ph. Ghendrih, S. Jolliet, G. Latu, E. Sonnendrücker and L. Villard. *Global full-f gyrokinetic simulations of plasma turbulence.* Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 49, no. 12B, page B173, 2007.
- [Grandgirard 2008] V. Grandgirard, Y. Sarazin, X. Garbet, G. Dif-Pradalier, Ph. Ghendrih, N. Crouseilles, G. Latu, E. Sonnendrücker, N. Besse and P. Bertrand. *Computing ITG turbulence with a full-f semi-Lagrangian code.* vol. 13, no. 1, pages 81 – 87, 2008. Vlasovia 2006 : The Second International Workshop on the Theory and Applications of the Vlasov Equation.
- [Greenwald 2010] Martin Greenwald. *Verification and validation for magnetic fusiona).* Physics of Plasmas (1994-present), vol. 17, no. 5, pages –, 2010.

- [Kadomtsev 1970] B B Kadomtsev and O P Porgutse. *Turbulence in toroidal systems*. Reviews of Plasma Physics, vol. 5, page 249, 1970.
- [Kormann 2014] K. Kormann. *A semi-Lagrangian Vlasov solver in tensor train*. arXiv :1408.7006., 2014.
- [Kra] *Krakatoa and Jessie : verification tools for Java and C programs*.
- [Lapillonne 2008] X. Lapillonne, S. Brunner, T. Dannert, S. Jolliet, A. Marinoni, L. Villard, T. Gorler, F. Jenko and F. Merz. *Effects of geometry on linear and non-linear gyrokinetic simulations, and development of a global version of the GENE code*. AIP conference proceedings, Joint Varenna-Lausanne International Workshop on Theory of Fusion Plasmas, vol. 1069, pages 289–294, 2008.
- [Lapillonne 2010] X. Lapillonne, B. F. McMillan, T. Görler, S. Brunner, T. Dannert, F. Jenko, F. Merz and L. Villard. *Nonlinear quasisteady state benchmark of global gyrokinetic codes*. Physics of Plasmas (1994-present), vol. 17, no. 11, pages –, 2010.
- [Lawson 1957] Lawson. Proc. Phys. Soc. B70, 1957.
- [Lorenz 1963] Edward N. Lorenz. *Deterministic Nonperiodic Flow*. J. Atmos. Sci., vol. 20, no. 2, pages 130–141, March 1963.
- [Mathur 2007] Manikandan Mathur, George Haller, Thomas Peacock, Jori E. Ruppert-Felsot and Harry L. Swinney. *Uncovering the Lagrangian Skeleton of Turbulence*. Phys. Rev. Lett., vol. 98, page 144502, Apr 2007.
- [Norscini 2014] C Norscini, P Ghendrih, T Cartier-Michaud, G Dif-Pradalier, D Milelli, Y Sarazin, J Abiteboul, D Estève, X Garbet, V Grandgirard and G Latu. *Turbulent transport close to marginal instability : role of the source driving the system out of equilibrium*. Journal of Physics : Conference Series, vol. 561, no. 1, page 012013, 2014.
- [Oberkampf 2002] William L. Oberkampf and Timothy G. Trucano. *Verification and validation in computational fluid dynamics*. Progress in Aerospace Sciences, vol. 38, no. 3, pages 209 – 272, 2002.
- [Oberkampf 2004] William L Oberkampf, Timothy G Trucano and Charles Hirsch. *Verification, validation, and predictive capability in computational engineering and physics*. Applied Mechanics Reviews, vol. 57, no. 5, pages 345–384, December 2004.
- [Orszag 1971] Steven A. Orszag. *On the Elimination of Aliasing in Finite-Difference Schemes by Filtering High-Wavenumber Components*. J. Atmos. Sci., vol. 28, no. 6, pages 1074–1074, September 1971.
- [Palermo 2015] F. Palermo. *Shear flow instabilities induced by trapped ion modes in collisionless temperature gradient turbulence*. Physics of Plasmas, 2015.
- [Patrick Knupp 2002] Kambiz Salari Patrick Knupp. *Verification of computer codes in computational science and engineering*. Chapman and Hall/CRC, 2002.
- [Reston 1998] Reston. *Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1998.

- [Riva 2014] Fabio Riva, Paolo Ricci, Federico D. Halpern, Sébastien Jolliet, Joaquim Loizu and Annamaria Mosetto. *Verification methodology for plasma simulations and application to a scrape-off layer turbulence code*. Physics of Plasmas (1994-present), vol. 21, no. 6, pages –, 2014.
- [Roache 2001] Patrick J. Roache. *Code Verification by the Method of Manufactured Solutions*. Journal of Fluids Engineering, vol. 124, no. 1, pages 4–10, November 2001.
- [Salari 2000] Kambiz Salari and Patrick Knupp. *Code verification by the Method of Manufactured Solutions*. Rapport technique, Sandia National Laboratories, 2000.
- [Sarazin 1998] Y. Sarazin and Ph. Ghendrih. *Intermittent particle transport in two-dimensional edge turbulence*. Physics of Plasmas (1994-present), vol. 5, no. 12, pages 4214–4228, 1998.
- [Sarazin 2005] Y. Sarazin, V. Grandgirard, E. Fleurence, X. Garbet, Ph. Ghendrih, P. Bertrand and G. Depret. *Kinetic features of interchange turbulence*. vol. 47, no. 10, pages 1817–1840, 2005.
- [Sarazin 2009] Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, D. Zarzoso, X. Garbet, Ph. Ghendrih and V. Grandgirard. *Entropy production and collisionless fluid closure*. vol. 51, no. 11, page 115003, 2009.
- [Schmitz 2014] L. Schmitz, L. Zeng, T.L. Rhodes, J.C. Hillesheim, W.A. Peebles, R.J. Groebner, K.H. Burrell, G.R. McKee, Z. Yan, G.R. Tynan, P.H. Diamond, J.A. Boedo, E.J. Doyle, B.A. Grierson, C. Chrystal, M.E. Austin, W.M. Solomon and G. Wang. *The role of zonal flows and predator–prey oscillations in triggering the formation of edge and core transport barriers*. Nuclear Fusion, vol. 54, no. 7, page 073012, 2014.
- [Strugarek 2013] A Strugarek, Y Sarazin, D Zarzoso, J Abiteboul, A S Brun, T Cartier-Michaud, G Dif-Pradalier, X Garbet, Ph Ghendrih, V Grandgirard, G Latu, C Passeron and O Thomine. *Ion transport barriers triggered by plasma polarization in gyrokinetic simulations*. Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 55, no. 7, page 074013, 2013.
- [Sweldens 2000] Wim Sweldens and Peter Schroder. *Building your own wavelets at home*. In Roland Klees and Roger Haagmans, editors, Wavelets in the Geosciences, volume 90 of *Lecture Notes in Earth Sciences*, pages 72–107. Springer Berlin Heidelberg, 2000.
- [Tamain 2014] P. Tamain, H. Bufferand, G. Ciraolo, C. Colin, Ph. Ghendrih, F. Schwander and E. Serre. *3D Properties of Edge Turbulent Transport in Full-Torus Simulations and their Impact on Poloidal Asymmetries*. Contributions to Plasma Physics, vol. 54, no. 4-6, pages 555–559, 2014.
- [Tamain 2015] P Tamain, Ph Ghendrih, H Bufferand, G Ciraolo, C Colin, N Fedorczak, N Nace, F Schwander and E Serre. *Multi-scale self-organisation of edge plasma turbulent transport in 3D global simulations*. Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 57, no. 5, page 054014, 2015.

- [Wu 2011] Wan Wu, Leigh S. McCue and Christopher J. Roy. *The method of manufactured solutions applied to chaotic systems*. Nonlinear Dynamics, vol. 63, no. 4, pages 667–679, 2011.
- [Y. C. Liang 2002a] H. P. Lee Y. C. Liang, W. Z. Lin S. P. Lim and C.G. Wu K. H. Lee. *Proper orthogonal decomposition and its applications part I THEORY*. Journal of Sound and Vibration, 2002.
- [Y. C. Liang 2002b] H. P. Lee S. P. Lim Y. C. Liang W. Z. Lin, K. H. Lee and H. Sun. *Proper orthogonal decomposition and its applications part II model reduction for mems dynamical analysis*. Journal of Sound and Vibration, 2002.

